

Known issues

Known issues

InChI Software v. 1.06

No-calc error, type 106-1 (1)

No-calc error, type 105-2 (4)

Renumbering issues (547)

InChI Software v. 1.05

No-calc error, type 105-1 (2)

No-calc error, type 105-2 (4)

Renumbering issues (2300)

InChI Software v. 1.06

The issues have been found by extensive tests for PubChem Compound and some other datasets.

No-calc error, type 106-1 (1)

DESCRIPTION

inchi-1 v. 1.06 could not produce Standard InChI string for given input Molfile; diagnostics is "Error -30016" (CANON_ERR).

TOTAL CASES

1

PubChem CID

92178689

No-calc error, type 105-2 (4)

DESCRIPTION

inchi-1 v. 1.06 could not produce non-standard InChI string (FixedH switch is ON) for given input Molfile; diagnostics is "Error -9993" (BNS_VERT_EDGE_OVFL).

TOTAL CASES

4

PubChem CID

58838784 91589474 101859000 101859001

Renumbering issues (547)

DESCRIPTION

InChI string produced by inchi-1 v. 1.06 changes upon renumbering atoms of input Molfile.

TOTAL CASES

547

PubChem CID

```
5150642 6337844 10771998 10771999 10899850 10899851 10953242 10985980 11378274
11521032 16007017 16153846 16154511 16156593 16720756 16720757 16720864 18711062
20615544
20615545 20764540 20764541 20829425 20829441 21024640 21024642 21024648 21028630
21028631
21028646 21028647 21028704 21028705 21028706 21028707 21028728 21028729 21028730
21028731
21028732 21028733 21028734 21028735 21028736 21028737 21028818 21028819 21028826
21028827
21028836 21028837 21028838 21028839 21028840 21028841 21044212 21044213 21044214
21044218
21044233 21361215 21361216 21361217 21361218 21361219 21361220 21361222 21361223
21361228
21361229 21361232 21361233 21361236 21361237 21361245 21361246 21361247 21361248
21361249
21361250 21361251 21361252 21361266 21361267 22835673 22979380 23382747 23382748
23596680
25014394 25035003 25035005 25035007 25035009 25035011 25035013 25035015 25035017
25035019
25045269 44147122 53290019 53291313 53291327 53291343 53291411 53291443 53291473
53291971
53292027 53292085 53292185 53292239 53292303 53292625 53292751 53292801 53292805
53292837
53292847 53292891 53292893 53292895 53293033 53293035 53293049 53293067 53293081
53293083
53293377 53293391 53293411 53293535 53293549 53293697 53293761 53293821 53294342
53295432
53295433 53295542 53295543 53295576 53295577 53296029 53296036 53296038 53296225
53296226
53296239 53296240 53296295 53296301 53296302 53296319 53296677 53296715 53296873
53296947
53296979 53297013 53297047 53297099 53297174 53878088 54721371 54728828 57082975
57225931
57238834 57250070 57319055 57925459 57998580 57998581 58594422 58594439 58594442
58594458
58594471 58619314 58729635 58729636 58729638 58729641 58729644 58766579 58774092
58774093
58774096 58774097 58915137 58915138 58915140 58915141 58915143 58915144 58915153
58915154
58915975 58915976 58988348 58988349 58989153 59081339 59106996 59124982 59124983
59205798
59205799 59215111 59215387 59222668 59310589 59310590 59317603 59317607 59317611
59422510
59422511 59422528 59422529 59422558 59422559 59422560 59422561 59422566 59422567
59523115
```

59523116 59523120 59523121 59523396 59523397 59523424 59523539 59523540 59523591
59523592
59538789 59538790 59538796 59538797 59538801 59538802 59538803 59538804 59538805
59538806
59538817 59538818 59538843 59538844 59538850 59538851 59538887 59538913 59538914
59538917
59538918 59538919 59538923 59538924 59538927 59538932 59538933 59538934 59654888
59654891
59654893 59654895 59734675 59734676 59734701 59734702 59735693 59735700 59735710
59769837
59769838 59775686 59789624 59789625 59886014 59886048 59896172 59896173 59896176
59896177
59896190 59896191 60015145 60025104 60025116 60034120 60034127 60036568 60108747
60108748
60140857 67011034 71475856 71552509 71552512 71594818 72370542 72419793 72419794
72419796
72419797 72461608 72530920 72562701 76184772 88370203 89291042 89393283 89495928
90268683
90477560 90826537 91287324 91290227 91546628 91556803 91595594 91606519 91868645
91868647
91868648 91868649 91868650 100918399 101455837 101455838 101455840 101455841
101550185 101706659
101777188 101777191 101985222 101985223 102371625 102371626 117782599 118143480
118143494 118143520
118143775 118143935 118390105 118653107 118856448 123364623 123493296 123614274
123654688 123670665
126605368 129805769 129805770 130309256 130309268 131977218 132549437 132549438
133695247 133695422
133695459 133695868 133695882 133695898 133696080 133696094 133696110 134935244
135565173 135565175
135565177 135565486 135565488 135565492 135700149 135760736 135990447 135990454
135999435 136005521
136005522 136005523 136005524 136005526 136005527 136008011 136008012 136009971
136016256 136018585
136018586 136018587 136018588 136018589 136018590 136018591 136018592 136018593
136022470 136022472
136022473 136032262 136034587 136036998 136037003 136037009 136037014 136037015
136037020 136037033
136037034 136037039 136037040 136037076 136037079 136037080 136037093 136037094
136037105 136037106
136037107 136037108 136037111 136037112 136037113 136037122 136037123 136037125
136037147 136037156
136037157 136037168 136037195 136037199 136037204 136037205 136037209 136037226
136037237 136037238
136037241 136040038 136043168 136043169 136044476 136054630 136054631 136058897
136061565 136090171
136092162 136104100 136104101 136109194 136109281 136141931 136153672 136158770
136164091 136164094
136164097 136164099 136164101 136164103 136164105 136164107 136164108 136164110
136164113 136164115
136164116 136164117 136164119 136164120 136165027 136166475 136176349 136195774
136195782 136195788
136199140 136210846 136347173 136384800 136438025 136438027 136438034 136466951
136466960 136478636
136491962 136494959 136505138 136579352 136623132 136634912 136641514 136642171
136648478 136649430
136651869 136653415 136653730 136654604 136655414 136657713 136658985 136660870
136723438 136732164

136768703 136830811 136857738 136857739 136866268 137031792 137036713 137086831
137160083 137199696
137248721 137248722 137248723 137248724 137248725 137833728 138059648 139033176
139141217 139142203
139188613 140711193 140940895 143862735 143962357 145533873 145559097 145656750

InChI Software v. 1.05

The issues have been found by extensive tests for PubChem Compound and some other datasets. Many issues have been fixed in v. 1.06; for still non-fixed issues, see the above section.

No-calc error, type 105-1 (2)

DESCRIPTION

inchi-1 v. 1.05 could not produce InChI string for given input Molfile; diagnostics is "Error -30010 (STEREOCOUNT_ERR)".

TOTAL CASES

2

PubChem CID

124897603 124921144

No-calc error, type 105-2 (4)

DESCRIPTION

inchi-1 v. 1.06 could not produce non-standard InChI string (*FixedH* switch is ON) for given input Molfile; diagnostics is "Error -9993" (BNS_VERT_EDGE_OVFL).

TOTAL CASES

4

PubChem CID

58838784 91589474 101859000 101859001

Renumbering issues (2300)

DESCRIPTION

InChI string produced by inchi-1 v. 1.05 changes upon renumbering atoms of input Molfile.

TOTAL CASES

2300

NOTE

The 1753 cases out of 2300 is already fixed in v. 1.06. They are related to the bug in normalization for some structures containing acidic hydroxy group at cationic heteroatom center. For still non-fixed issues, see the above section on v. 1.06.

PubChem CID

```
6326961 6330611 6330800 6330801 6330802 6330803 6335879 6336008 6336010 6336219
6337958 6337959 6343332 6344389 6347393 6356886 6372679 6375406 6379329 6385802
6393042 6398366 6540508 6584752 6602366 6858227 7272262 7367394 7720814 7720816
7720819 7720821 9794314 9921446 9921447 9921586 10033706 10486390 10486443
10671772
10753411 10809343 10952881 10974104 11115814 11150153 12026293 12069282 12164892
12164893
12164894 13512182 14327399 14362801 14366328 14376075 14376076 14376081 14695653
15431634
16130287 16130290 16130378 16130382 16130387 16132006 16132007 16132008 16132009
16132010
16132011 16132012 16132013 16132014 16132015 16132016 16132017 16134034 16134035
16134036
16134037 16134038 16134039 16134040 16134041 16134042 16134043 16186091 16186092
16186093
16186094 16186095 16204540 16204541 16204543 16204544 17819776 18641447 18645707
18668718
19008632 19087585 19087592 19357259 19759658 19759668 19759711 19759719 19759731
19788374
19789388 19789410 19789419 19789441 19789453 19789457 19789470 19789480 19811127
19878072
19878074 19878090 19878096 19878099 19878101 19878109 19878110 19880138 20156011
20211512
20230091 20295128 20330632 20330647 20330869 20330871 20330874 20330875 20345202
20345211
20352400 20447267 20475661 20563765 20681196 20730820 20978874 20978877 20978990
20979183
20981360 21621321 21621363 21621365 21621368 21621373 21621380 21621386 21621389
21621394
21686521 21686524 21686526 21686540 21686544 21686550 21703577 21845489 21845494
21845500
21845519 21845524 21845529 21868144 21868145 21868148 21868149 21868153 21868154
21868158
21868163 21868166 21868168 21868170 21868172 21868181 21896519 21896520 22162655
22162657
22164392 22419522 22447136 22824924 22851311 22902420 22961401 23137163 23137774
23284322
23412887 23415484 23591468 24994320 24994321 25195299 42626547 42626554 42626577
42626578
42626579 42626631 42626634 42626635 42626692 42626818 42626871 42626885 42626899
42626908
42626909 42626930 42626955 42626956 42626957 42626958 42626960 42626961 42627002
42627003
42627009 42627074 42627094 42627122 42627132 42627262 42627263 42627372 42627565
42627566
42627684 42627744 42627745 42627746 42627757 42627805 44320485 44475981 44475982
44543659
45479718 46174007 46224506 46224507 46943407 49766629 49767712 49767713 49767714
49767715
```

49767716 50904893 52918357 53301859 53377510 53377511 53488403 53488404 53488405
53488406
53488408 53488441 53488442 53488443 53684522 53702616 53718035 53742232 53758975
53800554
53836321 53841859 53850102 53851482 53897571 53898433 53902959 53904973 53908952
53918295
53992285 54023592 54058194 54067342 54071597 54162465 54165200 54171652 54231356
54245974
54260509 54274541 54308538 54324010 54378399 54382861 54400686 54487751 54554640
54579927
54590892 54590894 54590896 54590898 54590900 54590980 54590981 54592001 54592002
54592004
54592078 54592079 54592080 54592082 54592084 54592086 54592412 55302008 56634381
56965933
57006128 57006878 57015020 57071732 57083839 57092427 57112764 57153715 57158099
57158196
57174716 57196342 57202825 57212314 57279858 57281506 57296993 57301984 57318823
57345912
57345933 57345936 57346378 57352203 57352235 57371104 57375965 57375966 57447197
57517103
57518061 57518391 57518392 57519694 57765560 58003213 58221043 58221140 58221159
58221183
58275758 58481061 58581237 58678359 59066744 59401047 59795707 59865439 59930570
59930575
59930577 60134748 60138182 66557866 66594401 66594586 66594822 66601255 66661158
66663279
66669312 66677858 66724957 66725025 66851242 66851788 66872072 66883991 67029602
67567139
67567955 67588297 67588360 67588848 67588915 67590760 67590825 67590829 67590988
67591076
67591100 67591106 67591112 67591230 67591255 67591347 67591355 67591360 67591369
67591396
67591516 67591530 67591534 67591542 67591574 67591619 67591636 67591637 67591654
67591691
67591704 67591733 67591734 67591745 67610309 67610310 67630658 67643387 67676338
67676352
67676355 67676360 67676361 67676370 67676372 67676384 67676404 67676540 67676808
67676855
67676862 67676882 67676892 67676895 67676897 67676919 67676993 67676999 67677030
67677059
67677064 67677068 67677071 67677078 67677112 67677408 67677515 67677517 67677520
67677526
67677531 67677540 67677546 67677564 67677582 67677588 67677593 67677595 67677558
67677832
67677837 67677845 67677851 67677857 67677859 67677861 67677928 67678450 67678627
67678630
67714460 67714463 67714498 67714507 67714536 67714580 67714582 67714583 67714600
67714618
67714622 67714633 67714640 67714649 67714654 67714658 67714670 67714675 67714678
67714681
67714695 67714701 67714717 67714749 67714754 67714771 67714774 67714791 67714798
67714804
67714805 67714809 67714813 67714816 67714819 67714822 67714843 67714852 67714855
67714856
67714860 67714863 67714881 67714883 67714908 67714917 67714928 67714935 67714936
67714942
67714954 67714955 67714960 67714965 67714975 67714980 67714983 67715026 67715035
67715045

67715062 67715063 67715070 67715071 67715072 67715076 67715091 67715092 67715173
67715190
67715204 67715207 67715233 67715262 67715381 67715391 67715423 67715425 67715438
67715573
67720840 67799433 67799434 67830767 67839869 67858102 67881130 67898239 67898242
67898475
67898640 67898681 67898683 67899950 67899960 67907969 67930237 67932247 68124544
68133447
68133863 68133970 68134275 68134401 68134477 68134498 68136943 68137418 68328003
68364305
68607527 68620565 68620568 68620610 68620628 68620632 68620645 68621045 68621046
68621330
68621344 68621345 68622092 68622160 68634901 68660132 68818792 68850492 68911074
68919145
68923727 68925496 68927350 68927775 68934850 68957118 68987607 69002098 69002099
69008052
69008511 69008554 69008557 69009547 69115250 69115360 69115839 69116164 69116310
69241134
69242213 69255926 69255929 69294048 69294054 69294055 69294058 69294065 69294652
69294656
69294657 69294668 69294685 69294695 69294700 69294702 69294703 69294705 69294710
69294713
69294717 69294719 69294723 69294727 69294736 69294737 69295051 69295066 69295073
69295082
69295087 69295088 69295089 69295091 69295111 69295127 69295161 69295167 69296366
69296368
69296371 69296377 69296379 69296390 69296395 69296886 69296899 69296945 69296951
69296955
69296992 69297033 69297059 69297065 69297121 69297164 69324960 69342285 69346634
69405501
69405502 69597426 69622720 69645073 69729320 69730270 69751842 69751930 69753663
69753781
69966700 69966701 69966702 69970167 69970467 69970769 69971061 69971093 69971103
69971197
69971490 69971562 69971941 69972304 69972433 69972599 70057158 70139348 70150117
70150118
70151099 70151100 70151665 70151667 70151711 70151713 70151972 70151974 70152010
70152046
70152060 70152124 70152125 70152253 70152269 70152272 70152338 70152799 70152813
70152836
70152848 70152878 70153089 70153104 70153286 70153303 70153349 70153382 70153462
70153644
70153659 70153840 70154329 70154441 70154531 70154695 70182593 70210543 70216303
70217427
70218601 70262976 70263017 70263054 70263078 70263665 70266004 70266011 70266079
70266191
70266199 70266204 70266206 70266211 70266212 70266226 70266234 70266235 70266236
70266376
70266377 70266383 70266386 70266387 70266391 70266395 70266396 70266416 70266829
70266839
70266869 70266891 70267457 70267458 70298115 70315515 70327090 70367534 70367560
70367568
70379175 70423287 70436947 70447733 70455867 70476996 70476997 70527125 70566200
70566204
70670202 70680229 70699397 70699404 70824008 70876794 70885137 70920685 70920687
70992268
71014558 71014568 71014631 71047023 71053064 71081576 71121289 71134732 71188643
71198066

71216992 71297175 71297176 71305048 71333180 71406701 71414573 71434287 71581435
71748687
72563973 73211858 73350617 76673126 77003901 78067592 78350474 86750445 87065008
87097771
87112246 87118050 87122340 87178784 87190305 87263737 87263738 87263739 87263740
87276596
87276597 87277165 87277174 87277175 87277176 87328175 87334026 87350054 87376443
87462737
87462738 87475920 87518294 87518300 87518322 87518654 87518681 87518718 87518728
87518804
87518815 87518903 87518913 87518914 87518917 87520435 87520436 87524296 87541950
87580082
87586818 87608421 87617179 87618593 87618907 87618924 87624626 87652848 87657464
87657465
87674553 87679886 87692593 87694823 87710051 87740951 87754869 87770043 87771124
87784941
87793631 87793633 87812415 87820426 87845751 87847832 87871859 87871860 87872023
87872024
87872060 87872313 87872314 87872796 87872797 87873599 87873600 87884945 87902820
88040845
88040847 88054971 88061098 88062765 88062766 88063746 88081703 88081984 88082132
88082133
88082208 88082209 88082500 88096752 88125188 88125660 88157064 88157065 88179415
88186186
88195792 88195793 88201602 88203318 88203319 88211482 88212525 88212526 88212527
88219738
88219747 88224674 88235560 88239725 88240717 88242902 88242903 88256355 88268891
88272275
88272280 88287965 88287979 88288355 88288737 88288741 88288744 88288984 88288985
88302855
88303091 88303121 88303556 88303767 88306085 88306086 88322095 88326677 88326881
88334082
88377181 88379205 88379250 88379258 88379260 88379264 88379266 88379272 88379292
88379295
88379301 88379307 88379318 88379320 88379323 88379345 88379355 88379360 88379361
88379371
88379383 88379392 88379397 88379399 88379402 88379404 88379409 88379432 88379457
88379473
88379503 88379505 88379537 88379542 88379567 88379698 88383046 88383090 88383161
88383415
88413532 88429350 88429422 88429423 88429508 88429509 88429807 88429808 88429831
88429832
88430332 88430333 88430430 88430431 88437506 88437689 88437690 88438625 88440920
88440921
88440922 88441087 88446923 88455096 88455193 88455194 88455958 88455961 88456024
88464361
88482784 88490925 88493457 88494573 88501568 88501836 88501842 88509618 88517311
88517314
88517332 88517375 88517376 88517378 88517383 88517386 88517417 88517418 88517419
88519009
88530874 88530883 88536415 88556030 88564236 88579532 88579581 88579582 88593817
88596487
88603263 88603264 88611798 88620537 88620538 88620790 88634026 88636215 88636790
88636791
88651516 88651531 88660315 88664327 88667945 88668016 88668017 88674592 88674602
88695632
88709322 88709323 88720409 88720594 88777063 88777201 88777266 88784341 88784342
88785327

88800478 88801827 88801828 88809080 88821394 88854270 88855949 88855967 88873598
88874021
88880826 88892100 88896575 88899578 88899778 88899779 88899781 88899782 88899783
88899784
88899785 88899790 88899791 88899820 88899822 88899823 88899824 88906726 88914455
88914456
88914457 88914458 88914459 88914463 88914465 88914466 88914467 88914468 88914471
88914472
88914473 88914474 88917893 88917896 88917902 88917903 88917908 88930659 88932404
88934359
88934368 88934389 88935809 88953065 88965547 88971024 88990402 88996710 89001587
89027504
89031931 89031993 89042786 89049854 89064747 89069845 89075713 89150245 89150827
89169075
89177219 89177261 89180134 89180482 89180499 89188813 89195595 89208646 89213848
89257323
89268498 89289738 89290996 89294567 89295664 89295696 89303493 89314571 89314616
89323095
89323096 89323560 89326770 89339154 89354315 89360556 89384834 89385170 89385304
89385305
89385306 89402127 89418870 89426030 89426046 89436490 89440968 89464844 89502443
89595239
89669816 89678440 89688684 89691484 89738705 89803670 89812242 89812250 89817797
89877514
89884442 89946902 89984098 89984129 90087121 90087126 90087127 90087135 90087141
90087143
90087148 90087149 90087150 90087183 90125384 90125475 90195867 90195868 90195869
90195870
90195874 90295257 90306993 90306995 90306996 90307008 90339338 90350696 90356008
90447302
90448168 90676742 90709770 90940576 90963805 90977932 90991186 91062175 91131115
91164601
91378438 91471991 91472969 91479660 91534626 91600814 91617312 91820717 91885515
91885530
91976924 92001551 92021736 92021883 92022325 92542382 92542383 97550248 97550249
101035872
101035873 101075347 101105613 101117665 101123297 101126802 101139854 101143143
101143144 101143161
101221477 101343712 101387696 101387697 101387698 101422723 101527869 101531219
101531221 101531261
101533564 101533621 101589839 101591515 101592316 101592570 101609585 101617167
101617168 101617169
101650609 101664689 101707293 101736987 101743114 101813597 101985331 101985334
101987131 102056220
102058309 102058873 102058874 102060565 102210360 102267662 102267723 102268152
102268155 102269703
102269729 102401314 102515552 102532321 105539863 117072437 117614485 117688966
117688972 117723338
117753864 117754840 117755215 117755238 117756157 117768415 117781635 117781667
117781675 117781976
117782071 117883783 117958543 118019369 118019370 118019371 118019511 118049466
118074564 118153392
118282598 118282600 118286970 118311647 118331446 118426458 118448749 118478632
118478633 118478669
118478673 118478714 118478715 118478716 118478717 118478719 118478749 118478750
118494520 118494670
118494718 118500525 118536943 118640117 118669957 118703098 118860313 118896300
118964215 119058140

119058141 121291367 121291397 121291398 121291400 121291420 121313197 121349867
121376773 121376775
121387697 121488083 121488116 121499164 122198466 122371481 122371482 122371528
122450148 122450274
122468508 122574608 122588601 122599934 122599935 122599938 122634302 122634391
122699065 123133747
123141086 123153257 123163537 123166909 123190842 123196857 123204004 123242250
123248754 123323880
123326675 123339139 123342588 123386867 123428882 123440223 123462827 123488011
123536507 123548058
123607703 123622869 123647076 123702710 123731145 123738716 123757974 123765083
123765715 123806149
123810799 123816430 123828305 123867054 123881691 123901304 123909244 123970213
124134493 124134494
124134495 124149100 124188336 124188384 124197079 124201525 124255014 124255015
124255026 124255027
124288261 124288262 124288263 124288264 124288349 124288358 124288359 124288459
124288460 124288501
124288502 124288513 124288514 124288703 124288704 124288721 124288722 124288726
124288727 124288736
124288737 124925320 124925321 126419057 126419058 126419212 126419308 126456398
126493331 126493333
126512498 126550041 126552039 126552045 126552087 126552123 126556398 126563482
126567670 126594126
126594173 126594174 126594233 126594240 126594249 126594250 126594264 126594277
126594286 126594341
126594351 126594361 126594362 126594363 126594436 126594493 126594512 126594576
126594578 126594600
126594605 126594614 126594616 126594631 126594634 126594635 126594637 126594639
126594640 126594642
126594651 126594662 126594680 126594686 126594696 126594773 126594797 126594809
126594816 126594828
126594829 126594840 126594858 126594861 126594863 126594876 126594881 126594887
126594888 126594889
126594895 126594903 126594904 126594905 126594934 126594947 126594948 126594955
126594957 126594958
126594962 126594963 126594964 126594965 126594967 126594971 126594974 126594975
126595038 126595086
126595113 126595123 126595130 126595131 126595169 126595178 126595179 126595180
126595184 126595188
126595192 126595215 126595221 126595231 126595232 126595273 126595274 126595343
126595372 126595373
126595376 126595387 126595388 126595408 126595410 126595422 126595428 126595429
126595450 126595458
126595459 126595460 126595461 126595484 126595499 126595500 126595511 126609379
126635321 126660183
126669013 126724163 126724164 126724165 126970663 129010137 129011270 129011277
129025783 129066026
129081609 129093138 129093362 129102912 129120637 129121000 129121003 129121005
129121131 129130862
129130929 129130932 129130970 129130971 129140363 129162165 129190832 129200047
129231896 129231973
129236432 129236433 129236482 129236488 129236492 129236759 129261195 129316483
129626302 129662197
129689011 129689035 129804257 129821842 129849515 129856295 129994664 130178619
130206833 130230897
130254569 130255911 130270461 130270462 130270500 130270587 130296468 130296533
130296579 130296601

130313700 130313702 130313703 130313704 130313705 130313706 130313707 130313708
130313709 130316540
130316559 130316561 130316562 130316563 130316585 130316586 130316587 130316588
130316589 130316590
130316612 130316615 130316616 130316617 130316618 130316619 130316648 130316650
130330506 130640529
130690017 130729238 130737588 131230741 131240218 131633049 131711228 131711229
131711230 131711231
131711236 131800927 131873808