

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ

**ПОЛТАВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ ПЕДАГОГІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ В. Г. КОРОЛЕНКА**

Кафедра хімії та методики викладання хімії

Навчальний посібник для проведення лабораторних занять та самостійної роботи
з навчальної дисципліни

«Інформаційні технології у хімії»

підготовки здобувачів освітнього ступеня «бакалавр»

Галузь знань	10 Природничі науки
Спеціальність	102 Хімія
Освітня програма	«Хімія»



Полтава – 2023

УДК 54:004(075.8)

*Затверджено на засіданні Вченої ради Полтавського національного педагогічного
університету імені В.Г. Короленка
(Протокол №14 від 30 червня 2023 року)*

Укладач:

старший викладач кафедри хімії та методики викладання хімії Полтавського національного педагогічного університету імені В. Г. Короленка Куленко Олена Анатоліївна

РЕЦЕНЗЕНТИ:

кандидат хімічних наук, доцент, професор кафедри біотехнології та хімії Полтавського державного аграрного університету Крикунова Валентина Юхимівна.

кандидат хімічних наук, доцент кафедри хімії та методики викладання хімії Полтавського національного педагогічного університету імені В.Г. Короленка Кузнецова Тетяна Юріївна

Куленко О. А.

Інформаційні технології у хімії : навчальний посібник. – Полтава: ПНПУ імені В.Г. Короленка, 2023. – 64 с.

Навчальний посібник містить матеріал для підготовки до лабораторних занять та самостійної роботи здобувачів освіти спеціальності 102 Хімія: теоретичні питання для самостійної підготовки студентів, методичні рекомендації до виконання лабораторних робіт з інформаційних технологій у хімії завдання для самостійної роботи контрольні питання та список рекомендованої літератури для підготовки. Наведено опис лабораторних робіт з дисципліни «Інформаційні технології у хімії». Для кожної роботи надано короткі теоретичні відомості, вказівки щодо виконання лабораторних робіт та оформлення звіту. Навчальний посібник містить рекомендації щодо організації самостійної роботи студентів.

© Куленко О.А., 2023

© Полтавський національний педагогічний
університет імені В.Г. Короленка, 2023

Лабораторна робота № 1.

Побудова структурних формул хімічних сполук засобами графічних редакторів хімічних формул.

Мета роботи: оволодіти основними засобами побудови структурних формул хімічних сполук MarvinSketch, ChemDraw та ChemSketch.

Питання для самоконтролю

1. Програми для візуалізації хімічних структур.
2. Ліцензії на програмне забезпечення.
3. Огляд програмного забезпечення для створення хімічних формул.
4. Створення молекулярних моделей за допомогою спеціального програмного забезпечення MarvinSketch, ChemDraw та ChemSketch.
5. Можливості редакторів хімічних формул ChemSketch, ChemDraw, MarvinSketch.
6. Рівень представлення хімічних структур.
7. 3-D Рівень представлення хімічних структур.
8. Інтеграція даних спеціалізованих програм до програм пакету MS Office.

Короткі теоретичні відомості

Графічний редактор хімічних формул Marvin Sketch є складовою частиною програмного пакету Marvin фірми ChemAxon (<http://www.chemaxon.com>). Типова структура робочого вікна програми MarvinSketch представлена на рисунку 1.1. Вікно містить основні елементи: рядок заголовку, рядок меню, рядок стану, смуги прокрутки, робочу область, вертикальні і горизонтальні панелі інструментів.

Можливості програми дозволяють генерувати і візуалізувати структурну інформацію у різноманітних файлових форматах: MOL, MOL2, SDF, RXN, RDF (V2000/V3000), SMILES, SMARTS/SMIRKS (recursive), MRV, InChi, CML, PDB, тощо. Також зображення структурної формули можна зберегти у форматах PNG, JPEG, BMP, PNF.

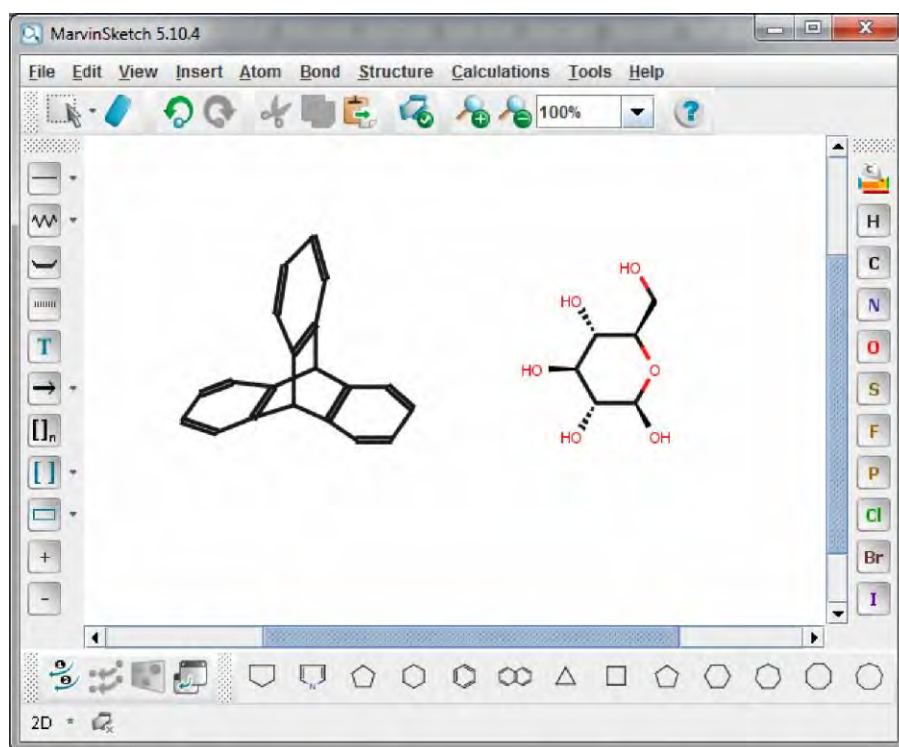


Рисунок 1.1 – Структура робочого вікна програми Marvin Sketch

За бажанням можна змінити зовнішній вигляд робочого вікна шляхом використання пункту **Configurations** меню View програми. Основні інструменти програми MarvinSketch наведені в таблиці 1.1.

Таблиця 1.1 – Основні інструменти програми MarvinSketch

Кнопка	Назва	Кнопка	Назва
	Ласо		Зв'язок
	Ластик		Ланцюг
	Відміна / Повтор		Стереозв'язок
	Ножиці		Пунктирний зв'язок
	Копія		Текст
	Вставка		Редактор метки
	Перевірка структури		Стрілка
	Збільшення/зменшення		Дужки
	Масштаб		Графіка

Права вертикальна панель робочого вікна програми містить основні

найпоширеніші елементі, які можна додавати до структури. Також можна ви-кликати інтерактивну періодичну систему елементів (рис. 1.2, а) та вибрати необхідний елемент, якщо він відсутній на основній панелі. У програмі є вкладка, що містить шаблони груп та спеціальних символів (рис. 1.2, б).



а

б

Рисунок 1.2 – Інтерактивна періодична система елементів (а) та шаблони груп та спеціальних символів (б) програми Marvin Sketch

Основні принципи побудови структурних формул є подібними до інших графічних редакторів хімічних формул. Панелі інструментів програми забезпечують швидкий доступ до основних команд побудови зв'язків, готових шаблонів, елементів хімічної графіки.

Меню **Insert** програми містить доступ до основних інструментів побудови зв'язків усіх типів, ланцюгів, стрілок, дужок та інших елементів хімічної графіки.

Доступ до повного переліку шаблонів програми MarvinSketch здійснюється через меню **Insert** пункт **Template Library** (рис. 1.3).

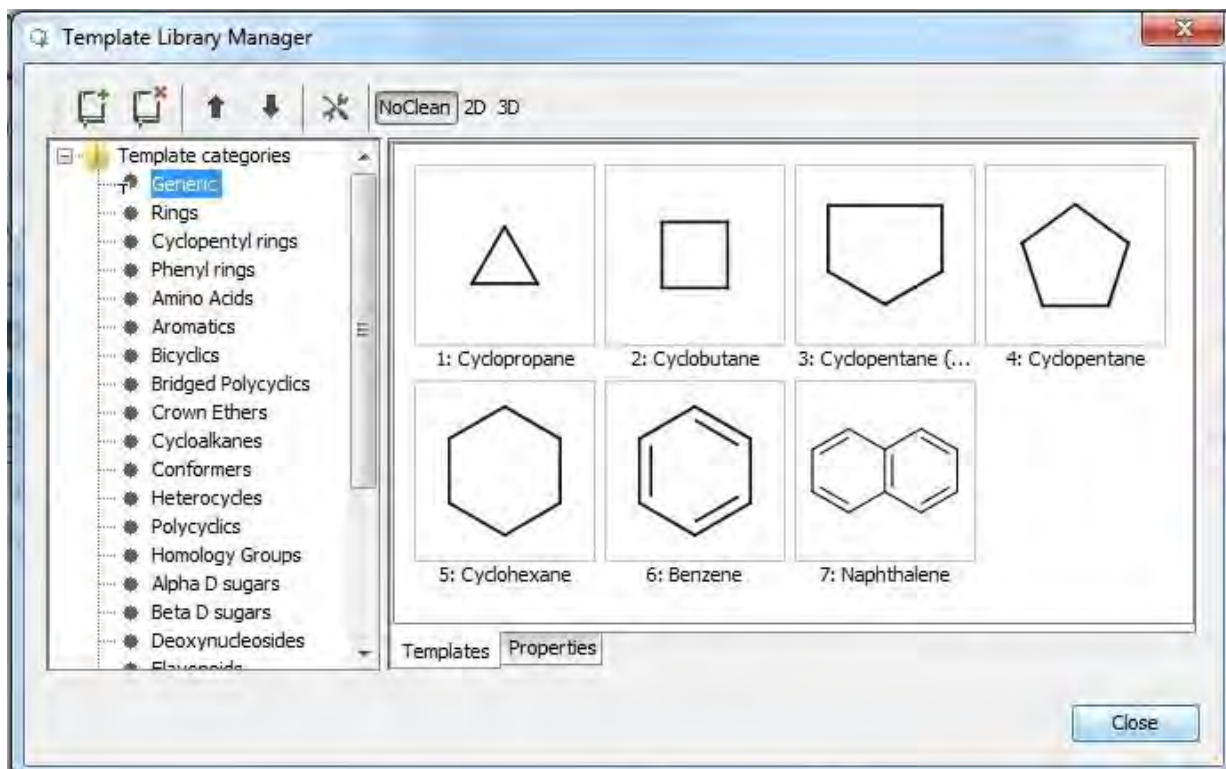


Рисунок 1.3 – Бібліотека шаблонів (*Template Library*) програми *Marvin Sketch*

Команда **Groups** меню **Insert** програми дає можливість додати до структури замісник простої будови, тоді як для побудови складних фрагментів молекули може бути використана команда **New Substituent**, яка відкриває одночасно нове вікно програми, де і будується окрема складний структурний фрагмент.

Графічний редактор хімічних формул ChemDraw є одним із компонентів інтегрованого пакету програм **ChemOffice** (<http://www.cambridgesoft.com/>). Він призначений для створення структурних формул хімічних сполук будь-якої складності, схем хімічних реакцій і елементів хімічної графіки. Це одна з найбільш поширених програм, що використовуються для відображення структурних формул хімічних сполук.

Робоче вікно програми містить наступні елементи: рядок заголовку, рядок основного меню, вертикальну і горизонтальну смуги прокрутки, панелі інструментів, робочу область і рядок стану (рис. 1.4).

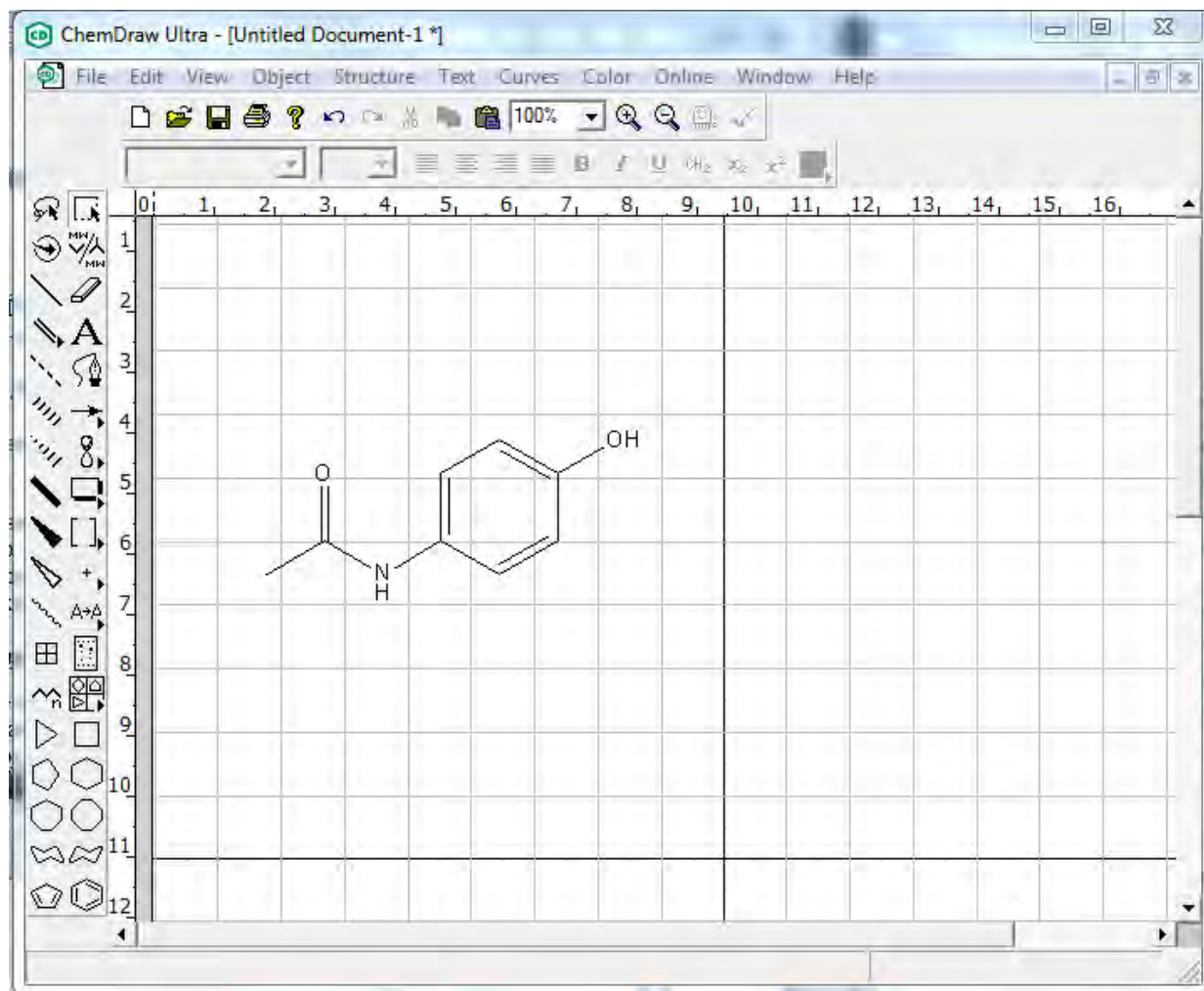


Рисунок 1.4 – Структура робочого вікна хімічного редактора ChemDraw

Програма дає можливість працювати з файлами різних форматів: CDX, SKC, JDX, MOL. Містить широкий спектр шаблонів хімічних структур і елементів хімічної графіки. Для хімічних структур можливі розрахунок і прогнозування великої кількості параметрів. Інтерфейс програми інтуїтивно зрозумілий, тому не потребує забагато зусиль до освоєння. Хімічні інструменти розташовані на лівій вертикальній панелі. До основних інструментів можна віднести *Ласо*, *Прямокутник*, *Зв'язок*, *Ластик*, *Множинний зв'язок*, *Текст*, *Пунктирний зв'язок*, *Перо*, *Реакційна стрілка*, *Стереозв'язок*, *Орбіталі* і ін.

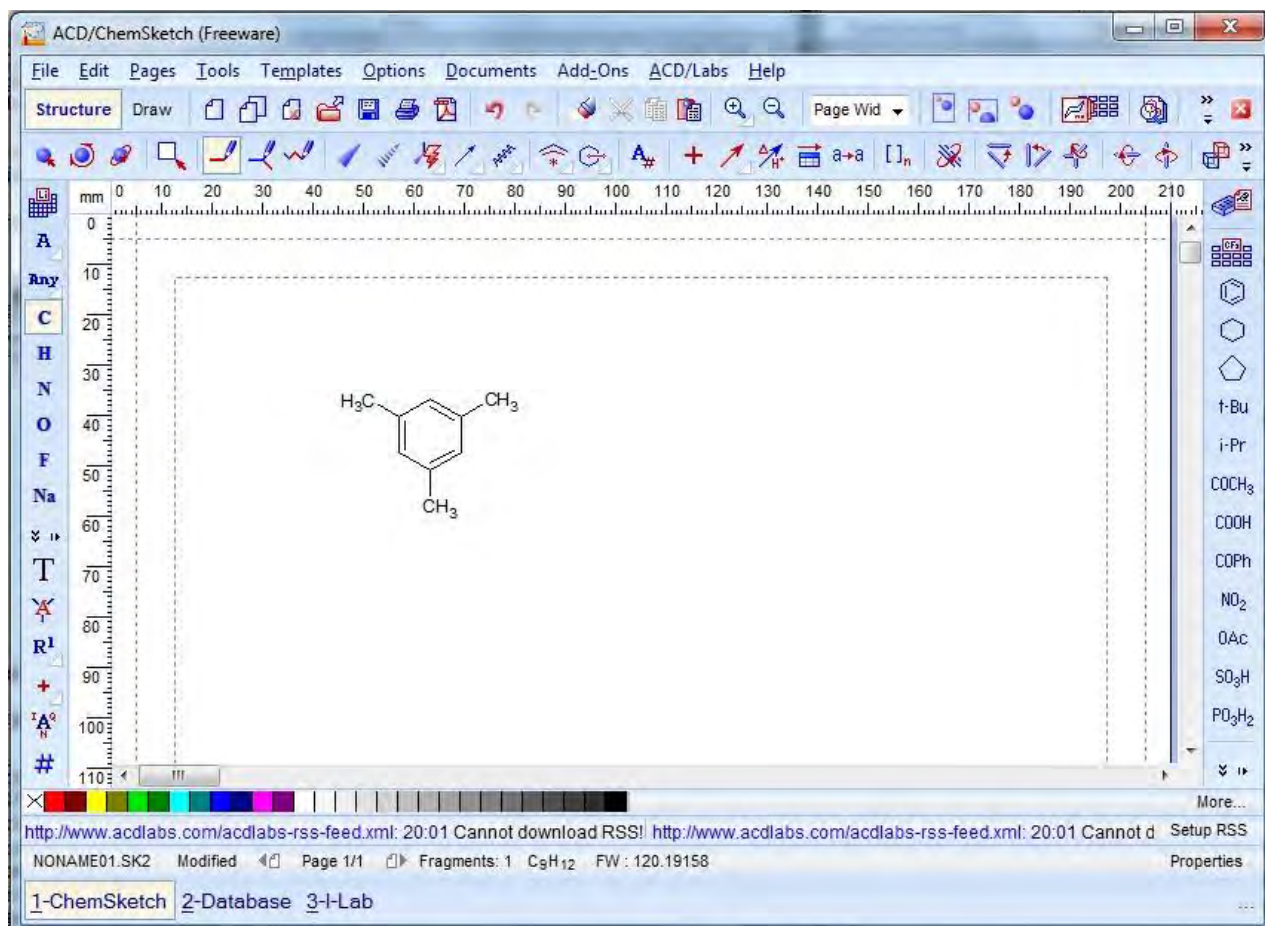
Графічний редактор хімічних формул ChemSketch з пакету програм ACD/Labs канадської фірми Advanced Chemistry Development орієнтований на роботу з структурними формулами органічних речовин середнього рівня складності. Він має велику бібліотеку готових формул, але в ньому зручно складати також хімічні формули неорганічних речовин. Основні можливості програми:

- створення структурних нескладних формул органічних речовин;
- створення структур речовин на основі лінійних кодів InChI і SMILES;
- створення структур Маркуша;
- створення схем реакцій;
- перетворення 2D-структурного ескізу в 3D-модель;
- вільне обертання в площині і 3D-обертання моделей;

- проведення пошуку хімічних структур у файлах різного формату через комп'ютерну файлову систему;
- проведення повного або часткового структурного пошуку;
- розрахунок молекулярної маси та елементного складу структури або структурного фрагмента;
- оцінка макроскопічних властивостей – молекулярної рефракції, молярного об'єму, густини та ін.;
- експорт створених файлів у PDF-формат, HTML-формат. Структура робочого вікна програми зображена на рисунку 1.5.

Панель інструментів редактора розташована нижче рядка меню програми і містить кнопки швидкого доступу до команд збереження і відкриття файлів, відміну і повтору дії, видалення, вирізання і копіювання фрагмента, масштабування, а також до ряду специфічних команд. На цій панелі знаходяться також кнопки **Structure** і **Draw**, які перемикають режим роботи редактора.

Редактор ChemSketch працює в двох режимах: **Structure** (Структура) і **Draw** (Малювання), що відрізняються призначенням і набором інструментів. У режимі **Структура** створюються структурні формули речовин, схеми і рівняння реакцій. Режим **Малювання** зручний для введення і редагування текстових блоків, створення таблиць, схем, нестандартних графічних об'єктів. У режимі **Структура** над робочою областю знаходиться панель інструментів, яка містить кнопки команд для створення і роботи з хімічними формулами. У режимі **Малювання** активною є панель інструментів для роботи з графічними об'єктами.



Панель **Атоми** розташована зліва від робочої області і активна лише в режимі **Структура**. Вона включає інструмент доступу до таблиці елементів Д.І. Менделєєва, кнопки, що позначають атоми, й інструменти для встановлення властивостей атома (заряд, валентність, номер тощо).

У режимі **Малювання** замість цієї панелі активною є панель інструментів **Автофігури**.

Панель **Радикали** розташована праворуч від робочої області. Вона містить таблицю радикалів, що дозволяє використовувати готові шаблони радикалів – різних структурних фрагментів. Активна ця панель лише в режимі **Структура**.

Робоча область програми являє собою окрему сторінку. Документ ChemSketch може містити одну або декілька таких сторінок. Їх у свою чергу можна копіювати і видаляти, використовуючи команди меню **Pages** програми. **Рядок стану** містить інформацію про загальне число сторінок, номер робочої сторінки, і кнопки для навігації між сторінками. Також включає довідкову інформацію: назву поточного файлу, число хімічних структур у робочій області, молекулярну формулу і масу виділеного фрагмента структури.

Формули сполук створюються в режимі **Структура**. Основою формули органічної сполуки є вуглеводневий скелет. Для його створення редактор містить три інструменти: **Draw Normal** (Малювати нормально), **Draw Continuous** (Малювати безперервно) і **Draw Chains** (Малювати ланцюжки). Щоб малювати саме вуглеводневі структури, окрім вибору інструмента треба вибрати на панелі атомів символ атома вуглецю. Будь-який з цих інструментів малювання зв'язків при кліканні на лінії зв'язку перетворить одинарний зв'язок у подвійний, потім у потрійний і знову в одинарний.

Циклічні структури можна малювати інструментом **Draw Continuous**. Щоб замкнути цикл, останній клік здійснюють на першому атомі вуглецю. Для циклів з великим числом атомів вуглецю можна використовувати інший спосіб: за допомогою інструмента **Draw Chains** малюють ланцюжок з потрібним числом атомів вуглецю, потім, використовуючи **Draw Normal**, з'єднують перший атом з останнім. У результаті отримують неоптимізовані цикли, що складаються з одних ліній. Щоб представити їх у правильному вигляді, використовують команду **Clean Structure** (F9) в пункті **Tools** головного меню програми. Для перетворення формули Кекуле в ароматичну структуру використовується команда меню **Tools – Show Aromaticity** (показати ароматичність), зворотна операція виконується командою **Hide Aromaticity**.

Для додавання нескладних циклічних структур можна скористатися відповідним шаблоном у таблиці радикалів (права панель). Інструмент для редагування і вставки групи знаходиться на панелі **Атоми** – кнопка **Edit Atom Label**. Для додавання групи атомів потрібно активувати цю кнопку, клацнути по атому в структурній формулі, який має бути замінений на групу або по вільному місцю сторінки поряд з формулою. При цьому відкривається діалогове вікно **Edit Label** (рис. 1.6). У цьому вікні вибрати в наявному списку формулу потрібної групи атомів або її умовне позначення, при цьому вибране з'являється у вікні редагування. Якщо потрібної формули немає, ввести її у вікні редагування, при цьому індекси вводяться

в рядок (спеціальна кнопка дозволяє вводити букви грецького алфавіту). Натиснути кнопку **Insert** (Вставити).

Готові структурні формули можна обертати, змінювати положення окремих атомів або фрагментів, змінювати розміри структури в цілому. Для переміщення формули або структурного фрагмента використовується інструмент **Select/Move** (Вибір/Переміщення). Після активації інструмента необхідно перетягуванням змінити положення атома або зв'язка, або цілої структури на робочій області.

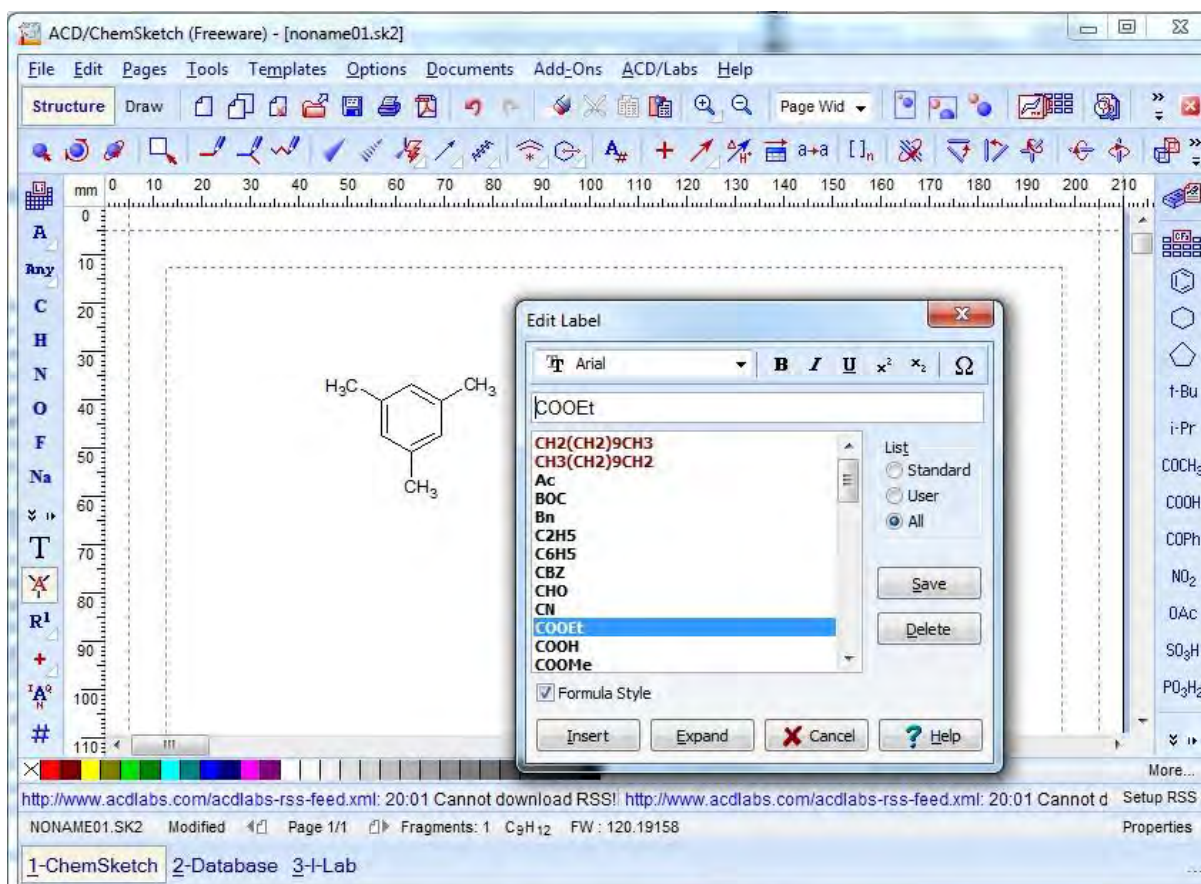


Рисунок 1.6 – Діалогове вікно *Edit Label* хімічного редактора *ChemSketch*

Інструмент **Select/Size/Rotation** (Вибір/Розмір/Обертання) забезпечує обертання структури у площині. Якщо виділити рамкою структуру або її фрагмент, то з'являються маркери зміни розміру фрагмента. Інструмент **3D-Rotation** (3D-Обертання) дозволяє обертати структуру або її фрагмент у просторі.

Можна змінювати положення структури або певного фрагмента відносно обраного зв'язка. Для цього використовують інструменти **Set Bond Vertically** (встановити зв'язок вертикально), **Set Bond Horizontally** (встановити зв'язок горизонтально) і **Flip on Bond** (відобразити відносно зв'язка). Кнопки **Flip ...** (відображення зверху вниз та зліва направо) потребують попереднього виділення структури чи фрагмента. В іншому випадку відбудеться відображення усієї сторінки.

Кнопка **Change Position** дозволяє змінити положення символів атома водню відносно вуглецевого атома. Для швидкого переходу до стандартного вигляду структури її необхідно виділити і скористатися кнопкою **Clean Structure**, яка

дозволяє вирівняти кути і довжини зв'язків у межах площини. Використання інструмента **3D Optimisation** приведе до повного розгортання формули.

Відображення усіх атомів водню, зв'язаних з вуглецевим скелетом структури, встановлюється за допомогою команди **Add Explicit Hydrogens** меню **Tools**. Команда **Remove Explicit Hydrogens** відповідного меню відмінює цю дію.

Порядок виконання роботи

Завдання 1. Відкрийте редактор хімічних формул **MarvinSketch**. Прогляньте елементи робочого вікна програми.

Використовуючи інструменти програми побудуйте структурні формули сполук, зображених на рисунку 1.7. При виконанні використовуйте прийоми копіювання об'єктів і доступні шаблони. За допомогою інструментів редактору для кожної структури перевірте правильність її побудови.

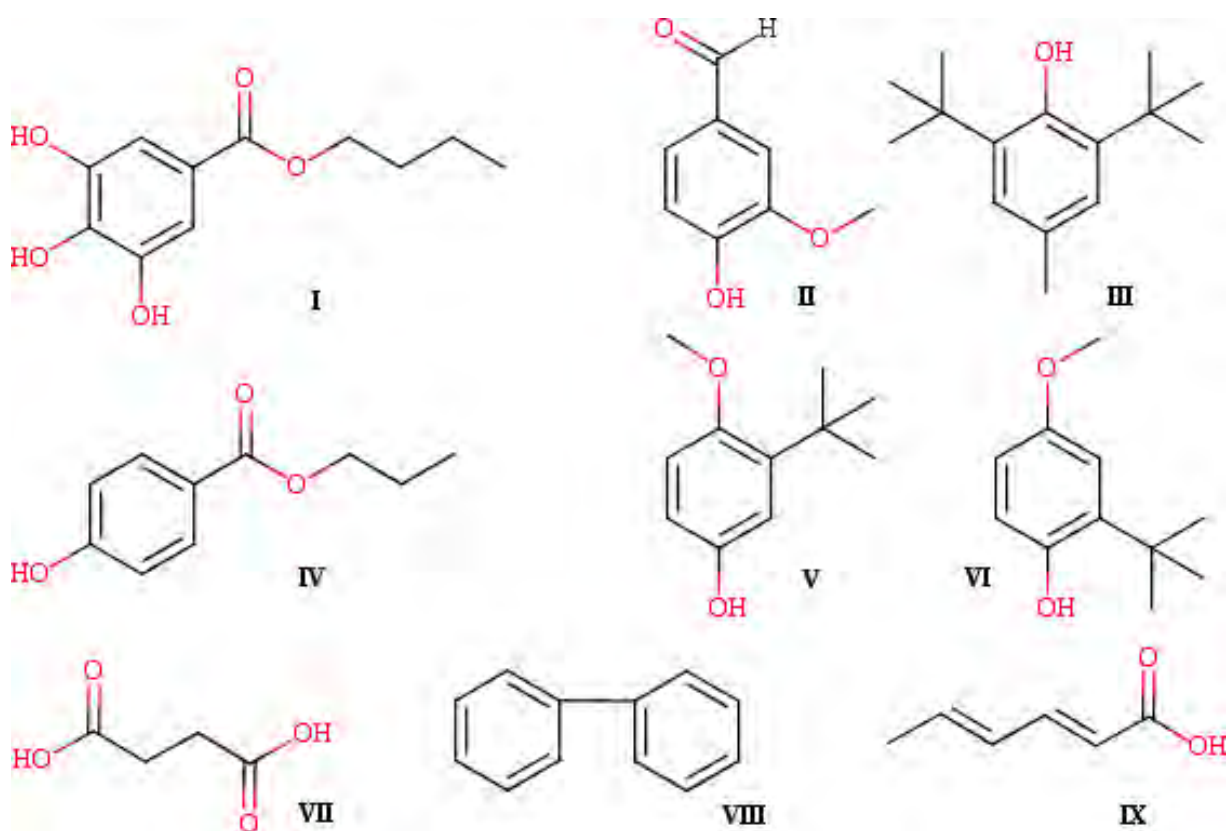


Рисунок 1.7 – Структурні формули сполук, які необхідно побудувати в редакторі хімічних формул **MarvinSketch**

Структурні формули повинні мати таке саме розташування, як на рисунку 1.7. Шрифт – Times New Roman, 12 pt.

Результати роботи необхідно зберегти у файлі з назвою Прізвище_Рік_Laba_1_X у форматах *.mrv і *.jpg (наприклад, **Ivanov_2021_Laba_1_1.mrv** та **Ivanov_2021_Laba_1_1.jpg**).

Завдання 2. Відкрийте редактор хімічних формул **ChemDraw**. Прогляньте елементи робочого вікна програми.

Використовуючи інструменти програми побудуйте структурні формули

сполук, зображених на рисунку 1.8. При виконанні використовуйте прийоми копіювання об'єктів і доступні шаблони. За допомогою інструментів редактору для кожної структури перевірте правильність її побудови.

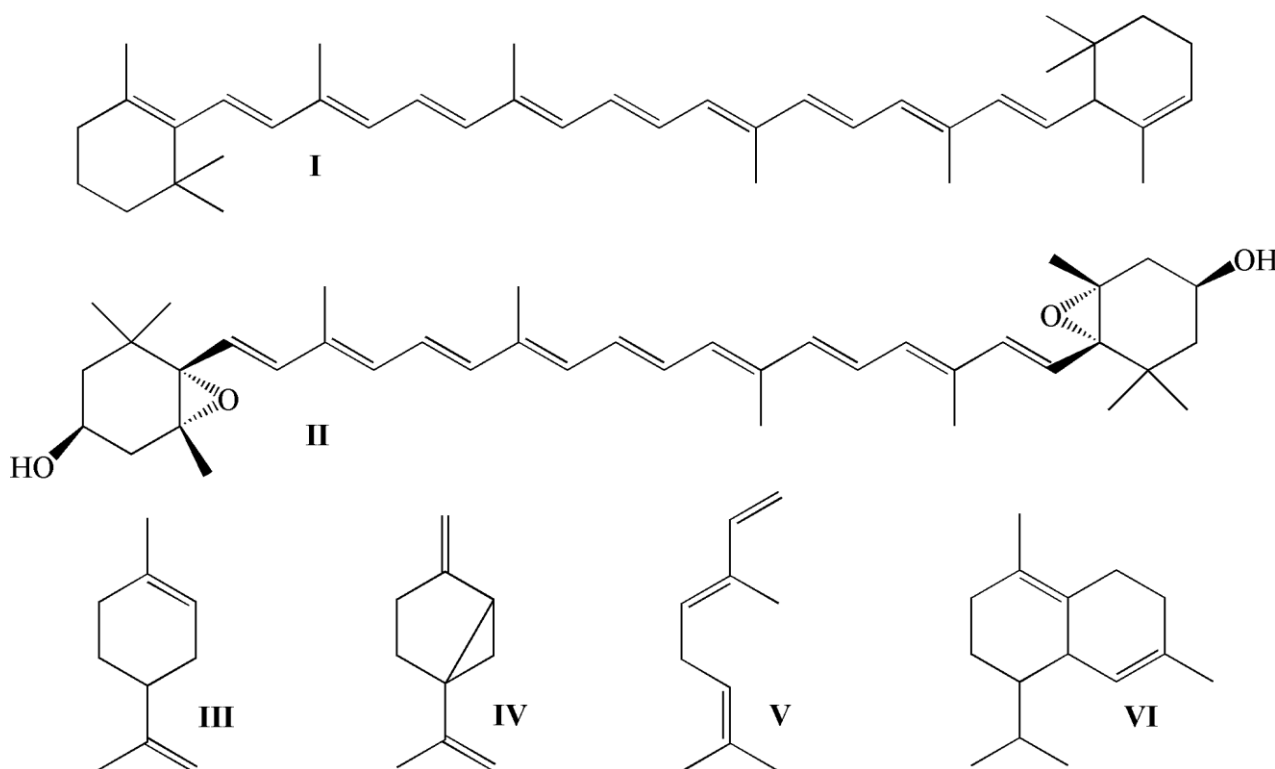


Рисунок 1.8 – Структурні формули сполук, які необхідно побудувати в редакторі хімічних формул ChemDraw

Структурні формули повинні мати таке саме розташування, як на рисунку 1.8. Шрифт – Times New Roman, 12 pt.

Результати роботи необхідно зберегти у файлі з назвою Прізвище_Рік_Laba_1_X у форматах *.sdx та *.png (наприклад, Ivanov_2021_Laba_1_2.cdx та Ivanov_2021_Laba_1_2.png).

Завдання 3. Відкрийте редактор хімічних формул *ChemSketch*. Прогляньте елементи робочого вікна програми.

Використовуючи інструменти програми побудуйте структурні формули сполук, зображених на рисунку 1.9. При виконанні використовуйте прийоми копіювання об'єктів і доступні шаблони. За допомогою інструментів редактору для кожної структури перевірте правильність її побудови.

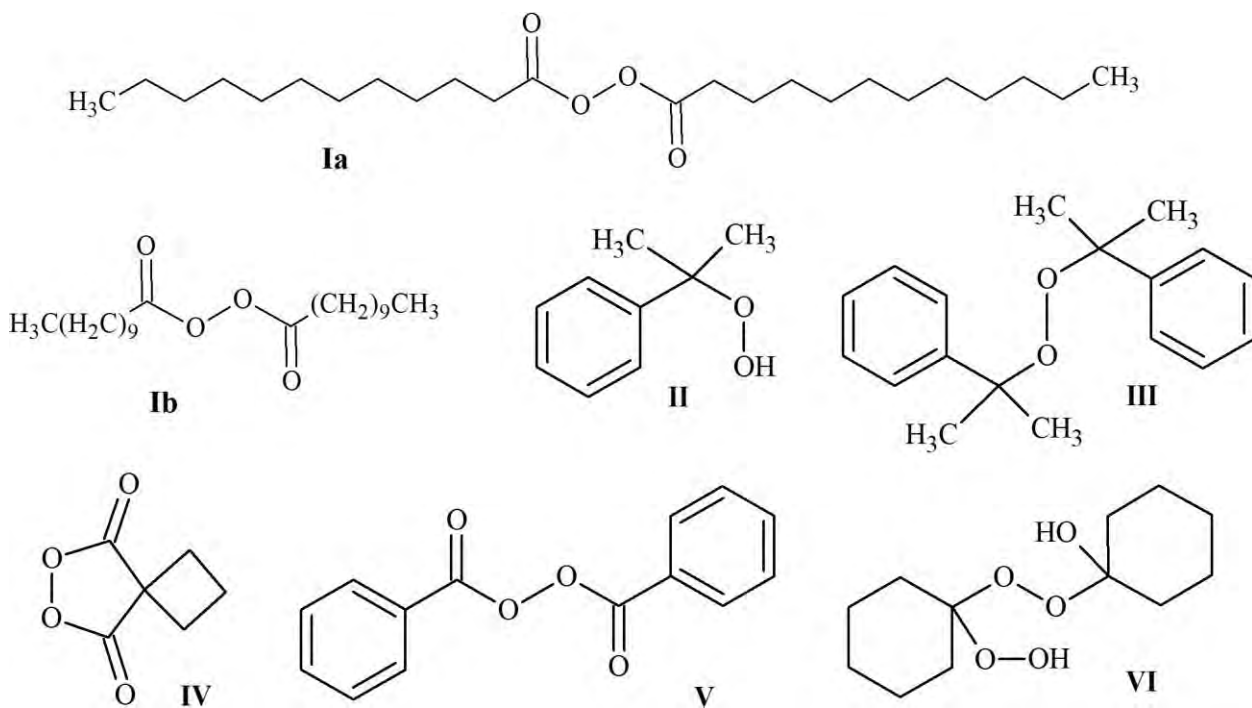


Рисунок 1.9 – Структурні формули сполук, які необхідно побудувати в редакторі хімічних формул ChemSketch

Структурні формули повинні мати таке саме розташування, як на рисунку 1.9. Шрифт – Times New Roman, 12 pt.

Результати роботи необхідно зберегти у файлі з назвою Прізвище_Рік_Laba_1_X у форматах *.sk2 та *.jpg (наприклад, **Ivanov_2021_Laba_1_3.sk2** та **Ivanov_2021_Laba_1_3.jpg**).

Контрольні питання

1. Охарактеризуйте можливості редакторів хімічних формул ChemSketch, ChemDraw, MarvinSketch.
2. Порівняйте принципи побудови структурних формул у різних графічних редакторах хімічних формул.
3. Вкажіть основні дії з об'єктами в програмних комплексах ChemSketch, ChemDraw, MarvinSketch.
4. Які основні файлові формати використовуються для збереження структурної інформації на 2D рівні?

Лабораторна робота № 2.

Використання можливостей графічних хімічних редакторів для створення лінійних кодів, назв та розрахунку властивостей хімічних сполук.

Мета роботи: оволодіння навичками створення лінійних кодів, назв та розрахунку властивостей хімічних сполук інструментами графічних редакторів хімічних формул MarvinSketch, ChemDraw та ChemSketch.

Питання для самоконтролю

1. Поняття графічного редактора. Його можливості.
2. Графічні редактори хімічних формул MarvinSketch, ChemDraw та ChemSketch.
3. Основні типи лінійних кодів, які можна згенерувати в програмах ChemSketch, ChemDraw, MarvinSketch.
4. Характеристика редакторів хімічних формул ChemSketch, ChemDraw, MarvinSketch щодо створення графічної продукції.

Короткі теоретичні відомості

В програмі MarvinSketch меню *Calculations* програми дозволяє для виділеної структури:

- розрахувати молярну масу і склад (команда *Elemental Analysis*),
- згенерувати назву за номенклатурою ІЮПАК і традиційну назву (команда *Naming*),
- прогнозувати величину рK_a (команда *Protonation*),
- прогнозувати параметри ЯМР ¹H і ¹³C спектрів (команда *NMR*),
- прогнозувати кількість і структуру ізомерів (команда *Isomers*) і конформерів (команда *Conformation*).

Лінійний код хімічної структури можна згенерувати за допомогою команди *Copy As Smiles* меню *Edit*.

У програмі ChemDraw для генерування назви сполуки на основі виділеної структурної формули використовується команда *Convert Structure to Name* в меню програми *Structure*. Команда *Convert Name to Structure* здійснює генерування структурної формули на основі назви сполуки за номенклатурою ІЮПАК.

Для виділеної структури можна прогнозувати параметри ЯМР спектрів за допомогою відповідних команд *1H-NMR Shifts* і *13C-NMR Shifts* в меню програми *Structure*.

Команда *Copy as...* меню *Edit* дозволяє згенерувати і розмістити в буфер обміну інформацію про хімічну сполуку у вигляді лінійних кодів SMILES та SLN.

Через меню *View* програми (команда *Show Analysis Window*) можна викликати окреме вікно для розрахунку деяких параметрів на основі структурної формули: молекулярної маси, елементного складу тощо.

В програмі ChemSketch для генерування назви сполуки на основі виділеної структурної формули використовується команда *Name for Structure* меню *Tools/Generate*. Меню *Tools/Generate* також дозволяє згенерувати лінійні коди SMILES і InChI. Характеристики хімічної сполуки (брутто-формулу, молярну масу, елементний склад) можна розрахувати за допомогою меню *Tools/Calculate*.

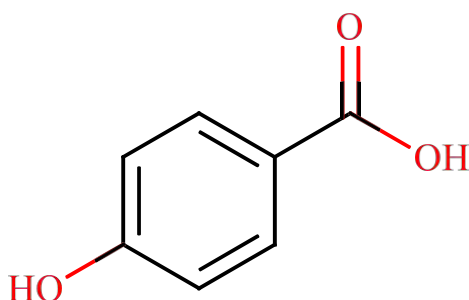
Порядок виконання роботи

При виконанні завдань цієї роботи необхідно використовувати графічні формули хімічних сполук, побудовані у лабораторній роботі № 1.

Завдання 1. За допомогою інструментів графічного редактору *MarvinSketch* для кожної структури, побудованої в лабораторній роботі №1 в даному редакторі, згенеруйте:

- традиційну назву (Traditional Name);
- назву за номенклатурою ІЮПАК (Preferred IUPAC Name);
- лінійний код SMILES (SMILES);
- молярну масу хімічної сполуки (Molecular Weight);
- брутто-формулу хімічної речовини (Formula);
- елементний склад хімічної сполуки (Composition).

Результати роботи оформите у вигляді, наведеному на рисунку 2.1. Шрифт – Times New Roman, 12 pt.



Traditional Name = p-hydroxybenzoic acid

Preferred IUPAC Name = 4-hydroxybenzoic acid

SMILES: OC(=O)C1=CC=C(O)C=C1

Molecular Weight = 138,122 g/mole

Formula = C₇H₆O₃

Composition: C (66.65%), H (6.71%), O (26.63%)

Рисунок 2.1 – Приклад оформлення результатів роботи у графічному редакторі *MarvinSketch*

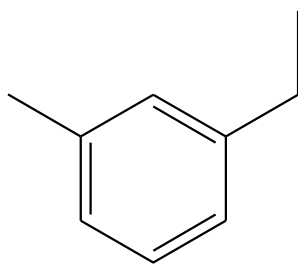
Результати роботи необхідно зберегти у файлі з назвою Прізвище_Рік_Laba_2_X у форматах *.mrv і *.jpg (наприклад, Ivanov_2021_Laba_2_1.mrv та Ivanov_2021_Laba_2_1.jpg).

Завдання 2. За допомогою інструментів графічного редактора *ChemDraw* для кожної структури, побудованої в лабораторній роботі №1 в даному редакторі, згенеруйте:

- назву хімічної сполуки (Name);
- лінійний код SMILES;
- лінійний код SLN;
- брутто-формулу хімічної речовини (Formula);
- молярну масу хімічної сполуки (Mol. Wt.);

– елементний склад хімічної сполуки (Elem. Anal.).

Результати роботи оформите у вигляді, наведеному на рисунку 2.2.
Шрифт – Times New Roman, 12 pt.



Name: 1-ethyl-3-methylbenzene
SMILES: CCC1=CC(C)=CC=C1
SLN: CCC[5]=CC(C)=CC=C@5
Formula: C₉H₁₂
Mol. Wt.: 120,19 g/mole
Elem. Anal.: C, 89,94%; H, 10,06%

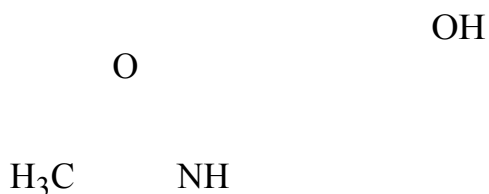
Рисунок 2.2 – Приклад оформлення результатів роботи у графічному редакторі ChemDraw

Результати роботи необхідно зберегти у файлі з назвою Прізвище_Рік_Laba_2_X у форматах *.sdx та *.png (наприклад, Ivanov_2021_Laba_2_2.cdx та Ivanov_2021_Laba_2_2.png).

Завдання 3. За допомогою інструментів графічного редактора *ChemSketch* для кожної структури, побудованої в лабораторній роботі №1 в даному редакторі, згенеруйте:

- назву за номенклатурою ІЮПАК (Name);
- лінійний код SMILES;
- лінійний код InChI;
- брутто-формулу хімічної речовини (Molecular Formula);
- молярну масу хімічної сполуки (Formula Weight);
- елементний склад хімічної сполуки (Composition).

Результати роботи оформите у вигляді, наведеному на рисунку 2.3. Шрифт – Times New Roman, 12 pt.



Name: N-(4-hydroxyphenyl)acetamide
SMILES = Oc1ccc(NC(C)=O)cc1
InChI = 1S/C8H9NO2/c1-6(10)9-7-2-4-8(11)5-3-7/h2-5,11H,1H3,(H,9,10)
Molecular Formula: C₈H₉NO₂
Formula Weight: 151.16256
g/mole

Composition: C (63.56%); H (6.00%); N (9.27%); O (21.17%)

Рисунок 2.3 – Приклад оформлення результатів роботи у графічному редакторі ChemSketch

Результати роботи необхідно зберегти у файлі з назвою Прізвище_Рік_Laba_2_X у форматах *.sk2 та *.jpg (наприклад, Ivanov_2021_Laba_2_3.sk2 та Ivanov_2021_Laba_2_3.jpg).

Контрольні питання

1. Охарактеризуйте можливості редакторів хімічних формул ChemSketch, ChemDraw, MarvinSketch щодо генерації лінійних кодів.
2. Порівняйте можливості редакторів хімічних формул ChemSketch, ChemDraw, MarvinSketch щодо визначення бруто-формули, молярної маси та елементного складу хімічних сполук.
3. Який з редакторів ChemSketch, ChemDraw, MarvinSketch є більш зручним у використанні і чому?
4. Які типи лінійних кодів можна згенерувати в програмах ChemSketch, ChemDraw, MarvinSketch?

Лабораторна робота № 3. 3-D Візуалізація хімічних структур.

Мета роботи: оволодіння основними засобами 3D хімічної графіки програми 3D Viewer на базі програмного комплексу ACDLabs: навичками створення 3-D моделей молекул хімічних сполук, їх редагування, вимірювання параметрів молекули.

Питання для самоконтролю

1. Типи молекулярних моделей за способом представлення.
2. Поняття молекулярна конфігурація і рівноважна молекулярна конфігурація.
3. Поняття конформації.
4. Способи задання Декартових координат.
5. Внутрішні координати.
6. Побудова Z-матриці.
7. Характеристика можливостей редактора хімічних формул ChemScketch щодо створення 3D-моделей хімічних структур.
8. Основні дії з 3D-моделями в програмному комплексі ChemScketch/3D Viewer.
9. Основні файлові формати, що використовуються для збереження структурної інформації на 3D рівні.

Короткі теоретичні відомості

Всі молекули є тривимірними об'єктами, тому досить часто виникають ситуації, коли треба враховувати явище *стереоізомерії*. Це можливе при використанні *3D-моделей* хімічних структур.

3D-Рівень представлення хімічної структури – представлення хімічних атомів і молекул на рівні їх просторових моделей.

Молекулярна модель – модель, що використовується при експериментальному та теоретичному вивченні молекул, при дослідженні їх електронної структури та взаємодій. Модель може бути розрахунковою або може відображати справжній фізичний об'єкт.

За способом представлення молекулярні моделі можна поділити на наступні: каркасні, стрижньові, кульково-стрижньові, об'ємні, стрічкові та багатогранники.

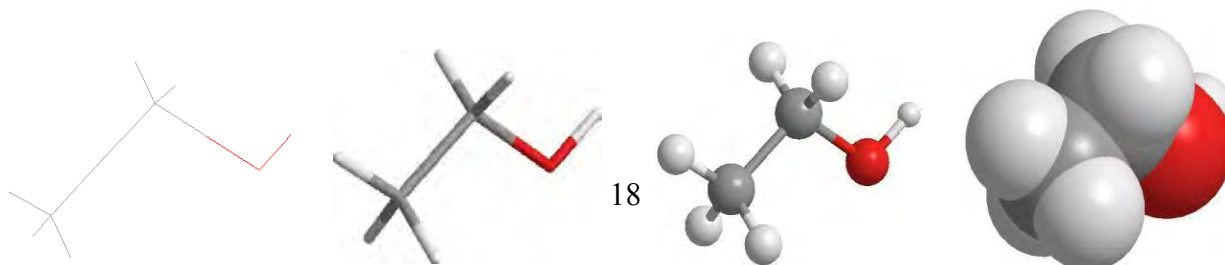
Каркасні моделі показують зв'язки між атомами молекули у вигляді тонких ліній (у вигляді каркасу) (рис. 3.1, а).

Стрижньові моделі показують об'ємні зв'язки між атомами молекули.

Один із варіантів каркасних моделей (рис. 3.1, б).

Кульково-стрижньові моделі представляють атоми та зв'язки між ними (рис. 3.1, в).

Об'ємні моделі відтворюють відносні атомні розміри в молекулі та форму молекули (рис. 3.1, г).



*a**б**в**г*

Рисунок 3.1 – 3D-молекулярні моделі етанолу:
a – каркасна модель; *б* – стрижньова модель;
в – кульково-стрижньова модель; *г* – об'ємна модель

Існують також **стрічкові моделі**, які відтворюють просторову будову складних біомолекул (рис. 3.2, а) та **багатогранники**, які використовуються для представлення моделей кристалічної будови речовини (рис. 3.2, б).

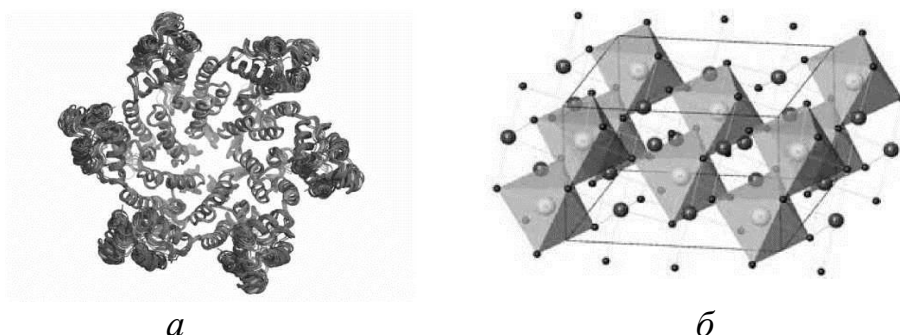


Рисунок 3.2 – Типи 3D-молекулярних моделей: *a* – стрічкова модель; *б* – багатогранники

На 3D-рівні представлення структурної інформації оперують такими поняттями як молекулярна конфігурація, рівноважна молекулярна конфігурація, конформація, конформер.

Молекулярна конфігурація – це просторове розміщення атомів молекули згідно величин структурних параметрів.

Рівноважна молекулярна конфігурація – це конфігурація молекули, що відповідає мінімуму її повної енергії.

Конформація – одне із неідентичних розташувань у просторі груп атомів даної молекули, що утворюється внаслідок обертання навколо одинарного зв'язку без його розриву зі збереженням стереохімічної конфігурації молекули.

Конформери – конформаційні ізомери, яким відповідають мінімуми на поверхні потенціальної енергії, і які знаходяться у рівноважному стані, хоча не можуть бути виділені через невисокий енергетичний бар'єр обертання (8 – 40 кДж/моль).

3D-Структуру можна представити у вигляді **декартових** або **внутрішніх координат**.

Одним із поширених способів представлення 3D-структури є її представлення у Декартовій системі координат (**Cartesian Coordinates**). При цьому наводиться інформація про точні *x*, *y* та *z* координати кожного атома молекули. Таким чином будується таблиця, в якій кожному атому відповідає окремий рядок, а кожній координаті – окремий стовпчик (рис. 3.3).

Інформація про 3D-структуру молекули у вигляді Декартових координат є складовою файлів форматів *.mol та *.xyz.

Другим найпоширенішим методом представлення 3D-структури молекули є

використання *внутрішніх координат* – довжин зв'язків, величин валентних і торсійних кутів. Внутрішні координати представляють просторове розміщення атомів хімічної частинки відносно один одного. Це представлення називають *Z-матриця* (рис. 3.4).

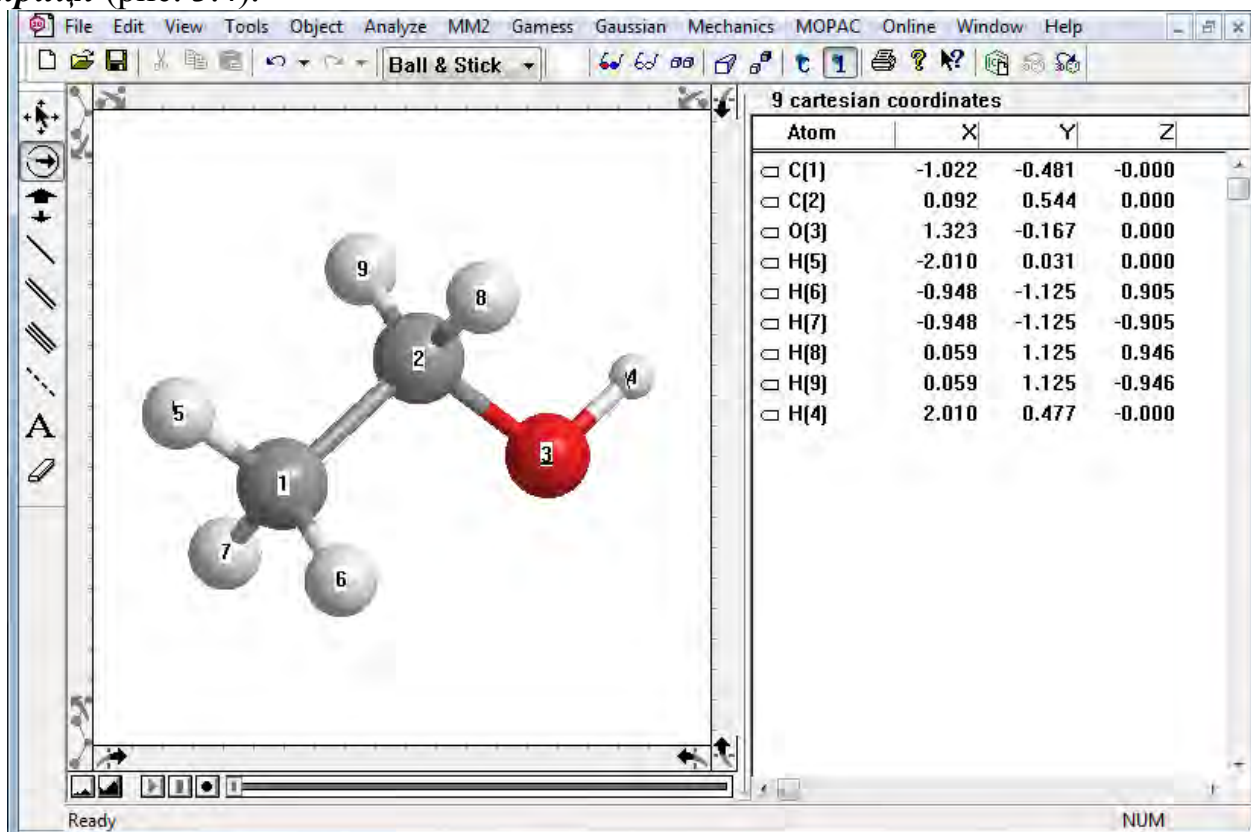


Рисунок 3.3 – Декартові координати молекули етанолу

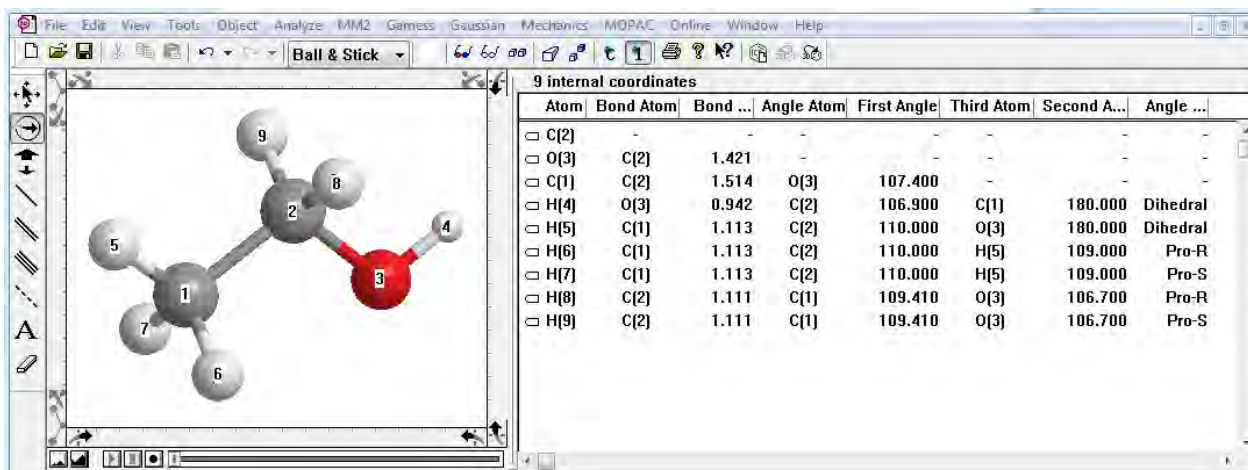


Рисунок 3.4 – Внутрішні координати (Z-матриця) молекули етанолу

Для правильної побудови Z-матриці а також її інтерпретації необхідно дотримуватися декількох правил. Кожний рядок Z-матриці описує один атом молекули. Перший стовбець матриці містить перелік усіх атомів даної молекули, другий – величини довжин валентних зв'язків, четвертий – величини валентних кутів, шостий – величини торсійних кутів. Перший атом (C₂), інформація про який

наведена у першому рядку, розташовується на початку системи координат. Другий атом (O_3) знаходиться від нього на відстані 1,421 Å (див. рис. 3.4). Третій атом (C_1) знаходиться на відстані 1,514 Å від першого атому C_2 . Величина валентного кута між атомами 1–2–3 ($C_1-C_2-O_3$) складає 107,400 °. Торсійний кут, який наведено у останньому стовпчику значень Z -матриці, – це кут, що утворюється між площинами відповідних атомів. На рисунку 3.4 перший торсійний кут 180,000 ° утворюється між площинами, які містять атоми $H_4-O_3-C_2$ і $O_3-C_2-C_1$, відповідно.

За виключенням перших трьох атомів, кожний атом у Z -матриці представлений набором із трьох внутрішніх координат. Загальна кількість параметрів, наведених у Z -матриці, може бути розрахована як $3N-6$, де N – кількість атомів у складі молекули.

Z -Матриця найчастіше використовується для введення вихідної структурної інформації у квантово-хімічних розрахунках, оскільки вона зручно представляє просторову будову молекули (молекулярну конфігурацію).

У вигляді Z -матриці інформація про 3D-структуру хімічної частинки є складовою файлів форматів *.zmt, *.gjf, *.dat і *.mor.

3D Viewer – програма для швидкої візуалізації просторової молекулярної конфігурації хімічних сполук. Вона входить до складу програмного комплексу ACD/Labs і повністю інтегрована з відповідним графічним редактором хімічних формул ChemSketch. Це дозволяє генерувати 3D-моделі хімічних сполук на базі їх 2D-структурних формул. Серед основних можливостей програми 3D Viewer слід зазначити наступні:

- можливість керування 3D-моделями: переміщення, обертання, зміна розмірів, кольорів, стилів;
- відображення молекули у вигляді просторових моделей різних типів: каркасної, стрижневої, кульково-стрижневої, у вигляді сфер або дисків;
- візуалізація поверхонь Ван-дер-Ваальса;
- вимірювання та редагування геометричних параметрів об'єкта: довжин зв'язків, валентних кутів, торсійних кутів;
- оптимізація молекулярної геометрії методом молекулярної механіки;
- автономне обертання об'єкта в просторі;
- експорт 3D-моделей в інші програмні продукти. Робоче вікно програми 3D Viewer (рис. 3.5) містить:
 - рядок меню;
 - панель інструментів;
 - робочу область;
 - рядок стану, який містить інформацію про ім'я поточного файлу та брутто-формулу активної структури;
 - екранні кнопки, які дозволяють швидкий перехід та обмін даними між вже завантаженими програмами комплексу Acd/Labs.

Визначення відстані між окремими атомами структури, торсійних кутів і кутів між зв'язками здійснюється в спеціальному режимі 3D перегляду – в програмі 3D Viewer. Для перемикання в даний режим слід в нижньому меню робочого вікна пакету ACD/Labs вибрати відповідний пункт. При цьому молекулярна структура, що знаходиться на робочому полі, буде скопійована в вікно перегляду (див. рис. 3.5).

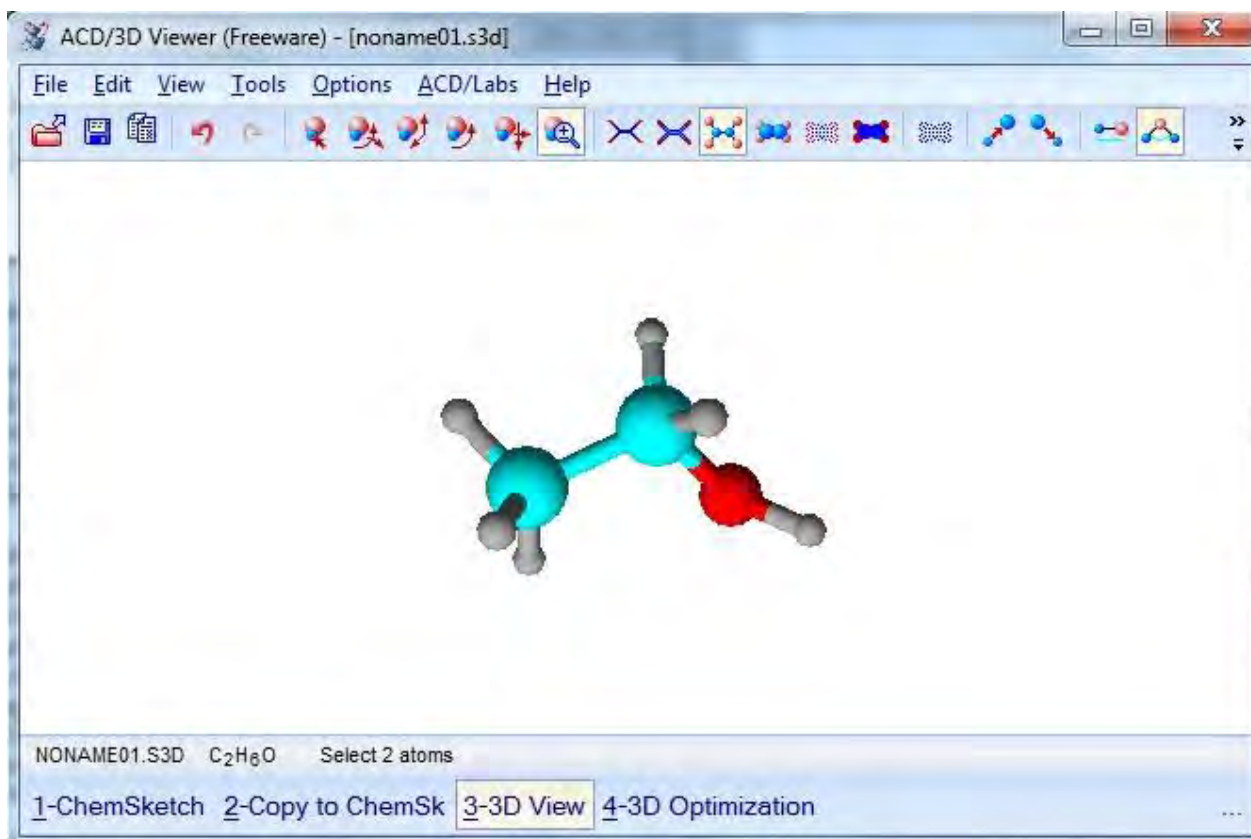


Рисунок 3.5 – Робоче вікно програми 3D Viewer

Панель інструментів в режимі перегляду представлена кількома блоками кнопок, функції яких дублюються в підпунктах основного меню. Перший блок містить кнопки: **Відкрити файл, Зберегти файл**.

У другому блоці знаходяться шість кнопок, які регламентують режими переміщення/обертання структури.

Далі розташовані кнопки, що дозволяють перемикаати режими відображення молекулярної структури у вікні перегляду: **каркасна модель, стрижньова модель, кульково-стрижньова модель, об'ємна модель, точкова модель, дискова модель**. Слідом за ними розташована кнопка вмикання/вимикання відображення прозорої об'ємної моделі, потім – кнопка **збільшення і зменшення радіусів атомів** (для деяких варіантів відображення структури).

За допомогою кнопок наступного блоку здійснюється:

- вимірювання відстані між атомами (рис. 3.6);
- вимірювання кутів між зв'язками (рис. 3.7);
- вимірювання торсійних кутів (рис. 3.8).

Якщо молекулярна структура побудована не за даними РСА, то перед виконанням вимірювань необхідно обов'язково оптимізувати просторову орієнтацію молекулярної структури. Це здійснюється за допомогою команди **3D оптимізації** в меню **Tools**.

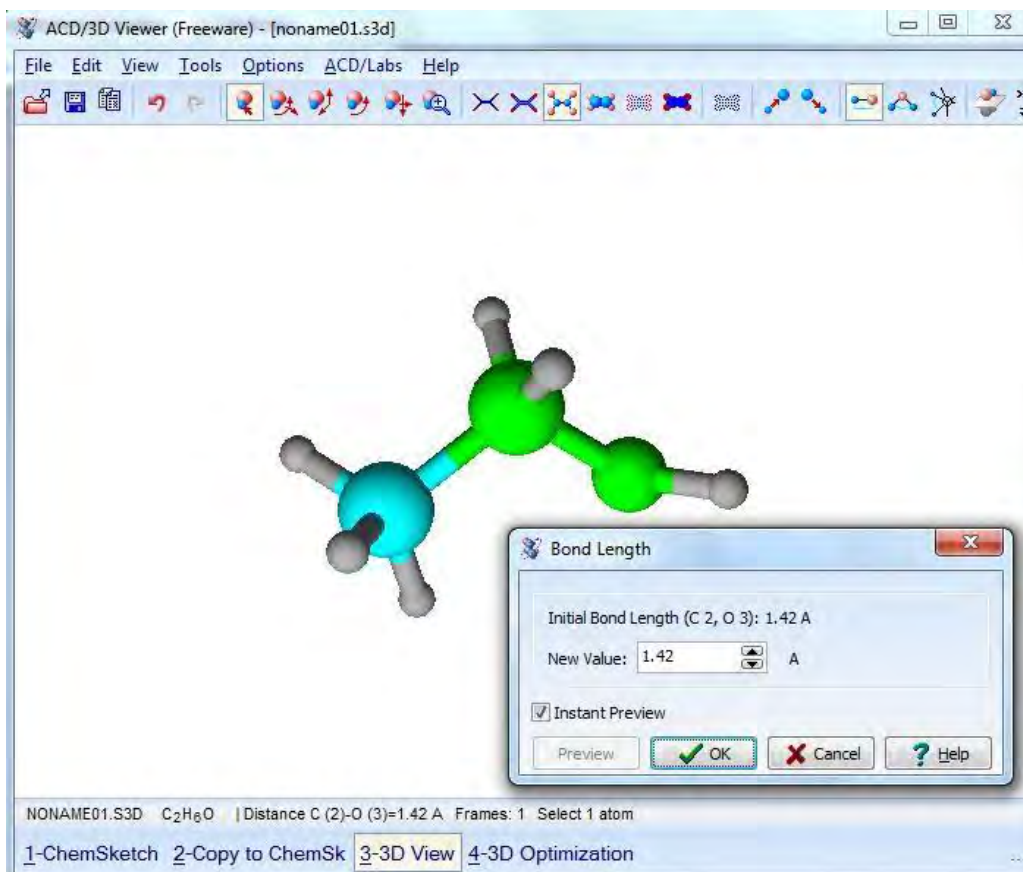


Рисунок 3.6 – Вимірювання довжини зв'язку

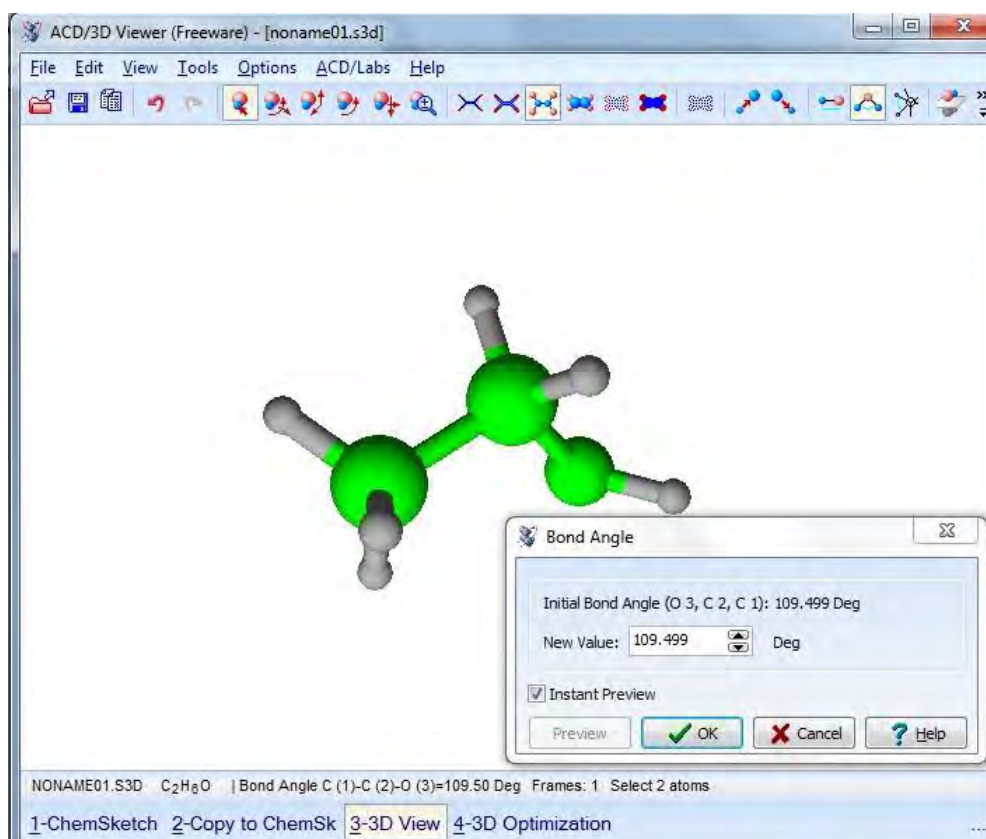


Рисунок 3.7 – Вимірювання валентного кута

Для вимірювання відстані між атомами (довжин зв'язків) необхідно натисканням активувати відповідну кнопку **Bond Length** і послідовно кліками виділити два атоми структури – вони при цьому змінюють колір на зелений (див. рис. 3.6). В області повідомлень відобразиться інформація про відстань між виділеними атомами.

Вимірювання кутів між зв'язками здійснюється за допомогою відповідної кнопки **Bond Angle** на панелі інструментів з послідовним виділенням трьох атомів (див. рис. 3.7).

При вимірюванні торсіонних кутів необхідно активувати кнопку **Torsion Angle** на панелі інструментів і виділити чотири атоми (рис. 3.8).

Для зручності роботи в програмі передбачені можливості **зміни кольорів** атомів і фону вікна перегляду (кнопка **Set Colors** на панелі інструментів), **автообертання молекули** (крайня права кнопка **Auto Rotate** на панелі інструментів) і **автообертання молекули зі зміною стилю структури** (меню **Tools** команда **Auto Rotate and Change Style**).

Для зручності роботи передбачені можливості **зміни кольорів** атомів і фону вікна перегляду (кнопка **Set Colors** на панелі інструментів), **автообертання молекули** (крайня права кнопка **Auto Rotate** на панелі інструментів).

Програма 3D Viewer дозволяє створювати анімації з обертанням молекулярних структур і зберігати їх у форматі GIF.

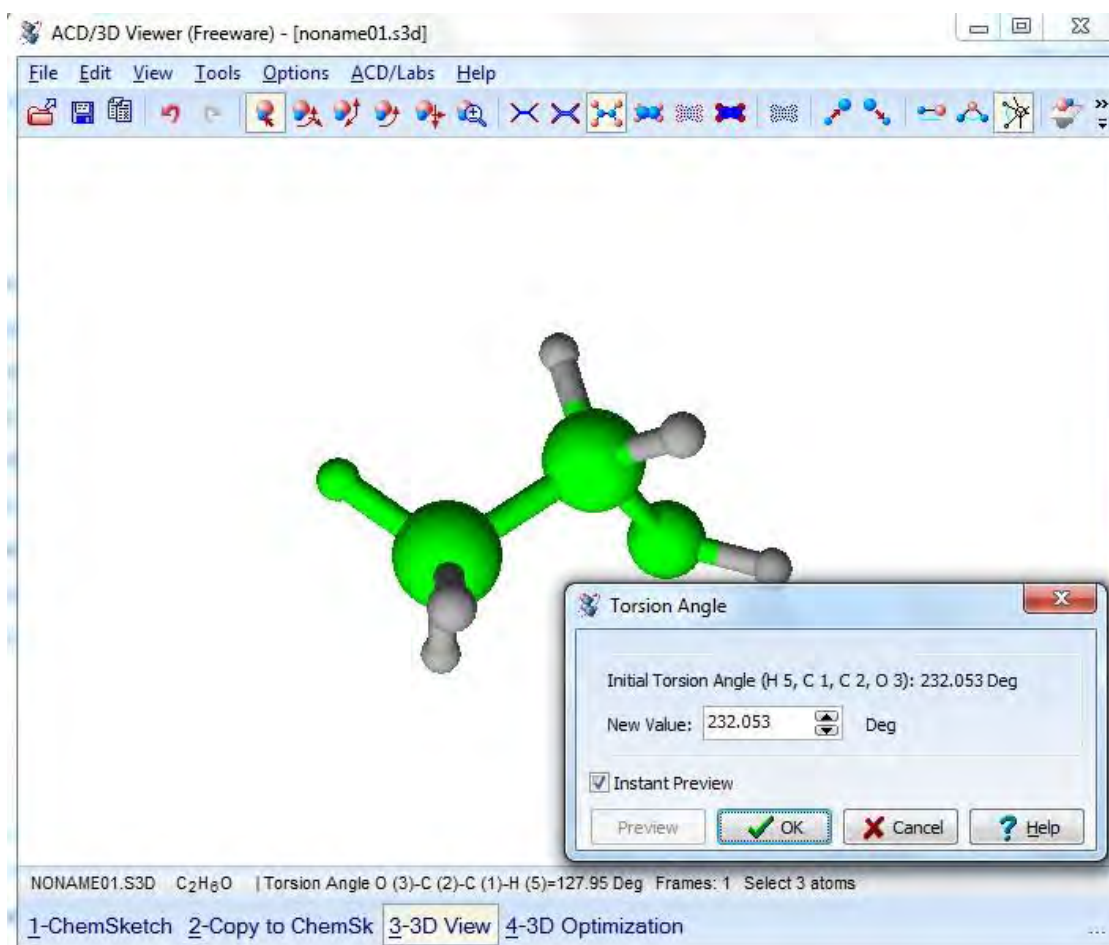


Рисунок 3.8 – Вимірювання торсійного кута

Порядок виконання роботи

При виконанні завдань цієї роботи необхідно використовувати графічні формули хімічних сполук, побудовані у лабораторній роботі № 1.

Завдання 1. Для кожної структури за допомогою інструментів графічного редактору *ChemSketch* і програми *3D Viewer* згенеруйте 3-D молекулярну модель. Для відображення атомів водню в структурі молекули необхідно активувати команду *Bond Length* меню *Tools*.

Генерування 3D-моделі на основі 2D-моделі здійснюється натисканням кнопки *3D Viewer* на верхній панелі інструментів робочого вікна програми ChemSketch.

Виконати *3D оптимізацію (3D Optimization)* молекулярної структури. На сторінці редактору ChemSketch необхідно розмістити назву сполуки, її 2D-модель і 3D-моделі у різних стилях: каркасна модель, стрижньова модель, кульково-стрижньова модель, об'ємна модель.

Переніс 3D-моделі на сторінку редактору ChemSketch із програми 3D Viewer здійснюється методом копіювання.

Для кожної структури необхідно розрахувати довжини зв'язків, валентні кути та торсійні кути (за вказівкою викладача).

Дані про кожну сполуку необхідно розмістити на окремій сторінці. Результати роботи оформите у вигляді, наведеному на рисунку 3.9. Шрифт – Times New Roman, 12 pt.

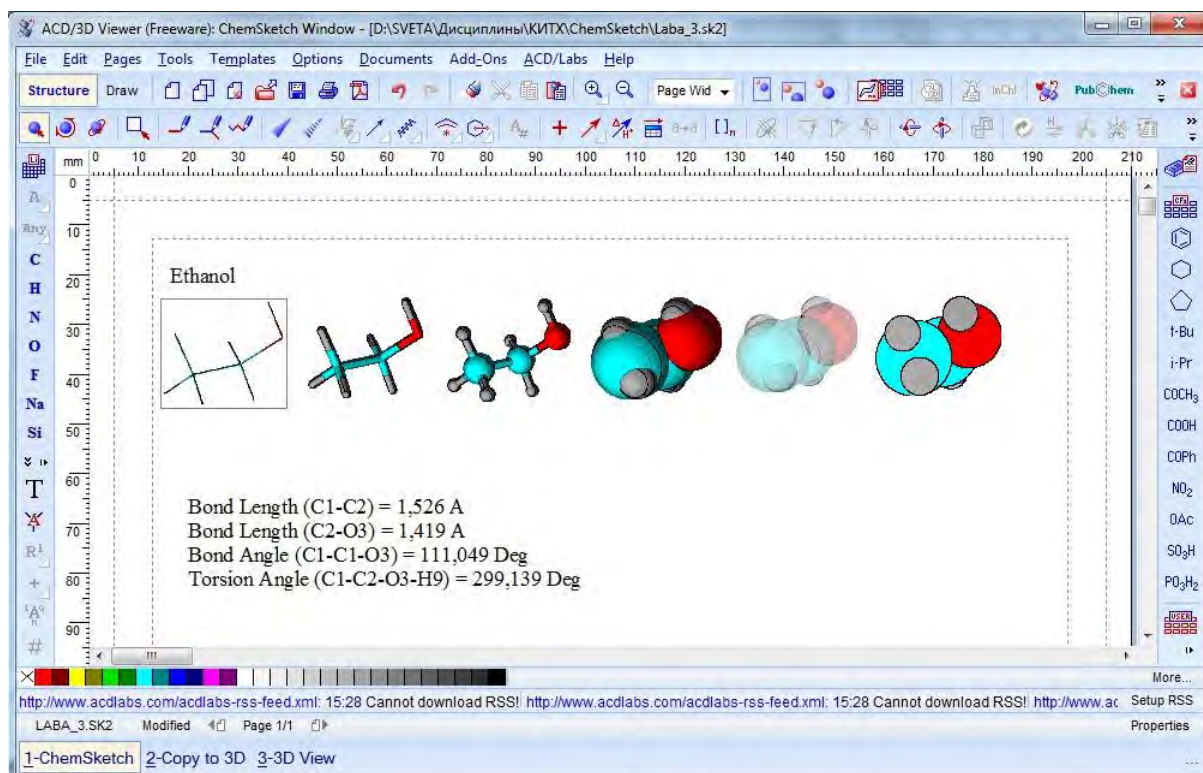


Рисунок 3.9 – Приклад оформлення результатів роботи у програмах ChemSketch та 3D Viewer

Результати роботи необхідно зберегти у файлі з назвою
Прізвище_Рік_Laba_3 у форматах *.sk2 та *.jpg (наприклад,
25

Контрольні питання

1. Які типи молекулярних моделей за способом представлення Ви знаєте?
2. Чим відрізняються молекулярна конфігурація і рівноважна молекулярна конфігурація?
3. Що таке конформація?
4. Як задаються Декартові координати?
5. Що таке внутрішні координати?
6. Як будується Z-матриця?
7. Охарактеризуйте можливості редактора хімічних формул ChemScketch щодо створення 3D-моделей хімічних структур.
8. Вкажіть основні дії з 3D-моделями в програмному комплексі ChemScketch/3D Viewer.
9. Які основні файлові формати використовуються для збереження структурної інформації на 3D рівні?

Лабораторна робота № 4.

Інтеграція даних спеціалізованих програм до програм пакету MS Office.

Мета роботи: оволодіння навичками вбудовування графічних об'єктів і текстової інформації із графічних редакторів хімічних формул MarvinSketch, ChemDraw та ChemSketch до програм пакету MS Office: Word, Excel та PowerPoint.

Питання для самоконтролю

1. Методи інтегрування об'єктів, створених програмами MarvinSketch, ChemDraw та ChemSketch, до програми Word.
2. Методи інтегрування об'єктів до програми Word, що надають можливість подальшого редагування об'єктів інструментами хімічних редакторів.
3. Формат файлів, створених програмами MarvinSketch, ChemDraw та ChemSketch, що дозволяє інтеграцію даних із цих файлів до програми Word і подальше редагування об'єктів.
4. Способи інтегрування результатів роботи у хімічних редакторах до програми Word у форматі рисунку.

Короткі теоретичні відомості

Microsoft Office – офісний пакет програм, створених корпорацією Microsoft для операційних систем Microsoft Windows, Windows Phone, Android, macOS, iOS. До складу цього пакету входить програмне забезпечення для роботи з різними типами документів: текстами, електронними таблицями, базами даних тощо. Microsoft Office поставляється в різних редакціях, які відрізняються складом пакету і ціною.

Найпоширеніші програми, що входять до пакету, – це текстовий процесор Microsoft Word, табличний процесор Microsoft Excel, персональний комунікатор Microsoft Outlook, програма підготовки презентацій Microsoft PowerPoint, програма для управління базами даних (СУБД) Microsoft Access.

Програма **Word** призначена для роботи з різноманітними текстовими документами. Word дозволяє:

- створювати текстові документи будь-якої складності та спрямування: наукові; юридичні; фінансово-економічні; художні тощо;
- редагувати та формувати документи з метою полегшення їх розуміння і читання;
- додавати до текстів різноманітні ілюстративні матеріали: таблиці, діаграми, фотографії, малюнки та схеми тощо;
- використовувати численні та різноманітні вбудовані інструменти (для створення векторних рисунків, таблиць, діаграм, інструменти для редагування растрових малюнків, тощо), що дозволяють виконувати багато завдань без додаткового залучення спеціалізованих програмних продуктів;
- зберігати документи не тільки в форматі Word, але й в інших форматах, наприклад, в форматі PDF, HTML або шаблонів, що суттєво полегшує публікацію та розповсюдження документів;
- використовувати вбудовану мову програмування Visual Basic for Applications (VBA) для створення повнофункціональних додатків з інтерфейсом користувача у

вигляді екранних форм з елементами керування і багато ін.

Але ця програма незручна для створення хімічних формул, особливо органічних сполук. При підготовці докладів, документів, звітів хімічного напрямку більш раціонально хімічні формули створювати у спеціальних хімічних редакторах, а потім вбудовувати до відповідного документу в форматі Word.

У документи, створені програмою Word, можуть бути додані різноманітні об'єкти, що дає можливість зробити документи більш змістовними і зрозумілими.

Об'єкти, створені програмами MarvinSketch, ChemDraw та ChemSketch, можна додати до документу Word методом копіювання. Спочатку цей об'єкт треба виділити на робочому полі відповідної програми і активувати команду *Copy* (*Копіювати*) у меню програми або натиснути *Ctrl+C*. Потім треба підвести курсор миші до потрібного місця в документі Word і активувати команду *Past* (*Вставити*) або натиснути *Ctrl+V*.

При копіюванні об'єкту із робочого вікна програми MarvinSketch при використанні команди *Copy As* (*Копіювати Як*) є можливість вибрати формат, в якому буде представлена інформація в документі Word (рис. 4.1). Але слід враховувати, що графічне зображення структурної формули хімічної сполуки в цільовому документі Word можна отримати тільки при використанні форматів *Image* (див. рис. 4.1). Об'єкт при цьому вбудовується в документ як рисунок і не може в подальшому редагуватися інструментами програми MarvinSketch.

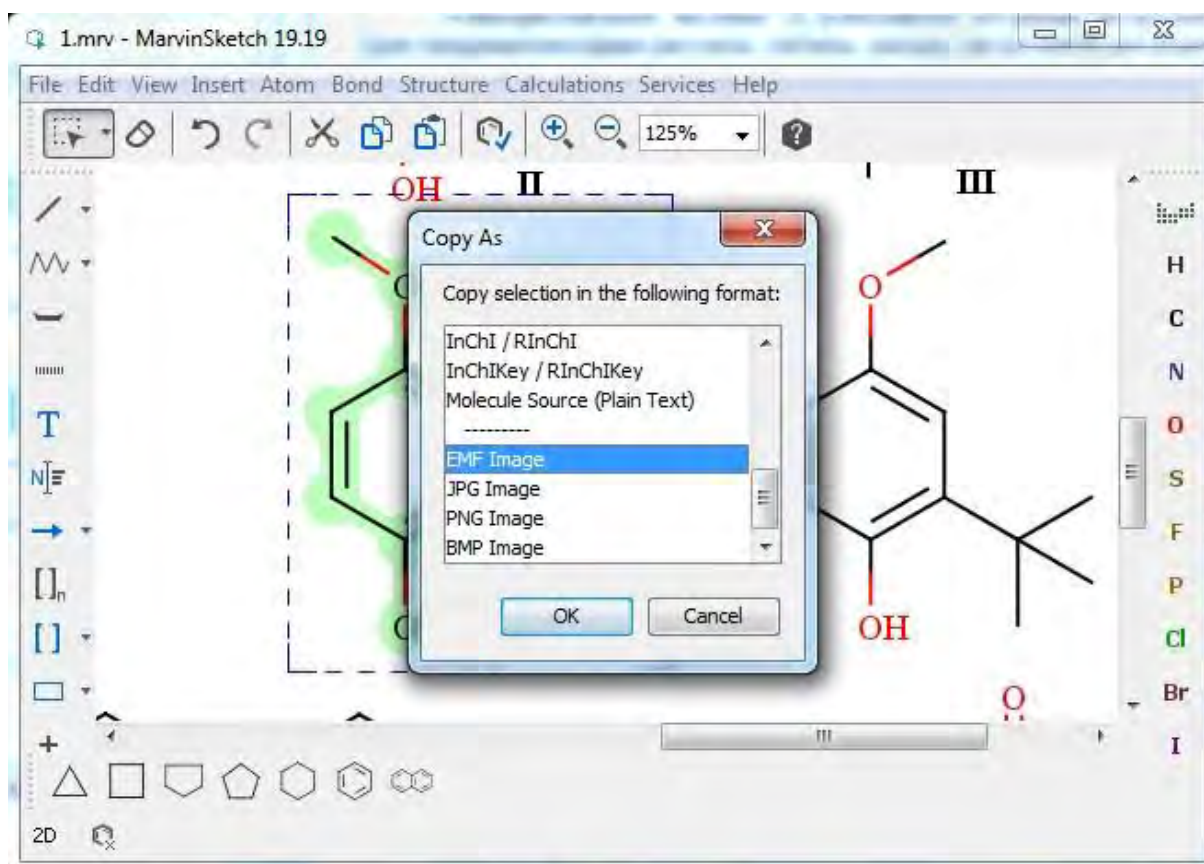


Рисунок 4.1 – Копіювання об'єктів із програми MarvinSketch

При копіюванні хімічної формули або іншого об'єкту із робочого вікна

програми ChemDraw об'єкт в документ Word вбудовується як об'єкт CS ChemDraw Drawing (рис. 4.2) з можливістю подальшого редагування інструментами програми ChemDraw. Редагування можна здійснювати після активації команди **Edit** (**Редагування**) або **Open** (**Відкрити**) (див. рис. 4.2).

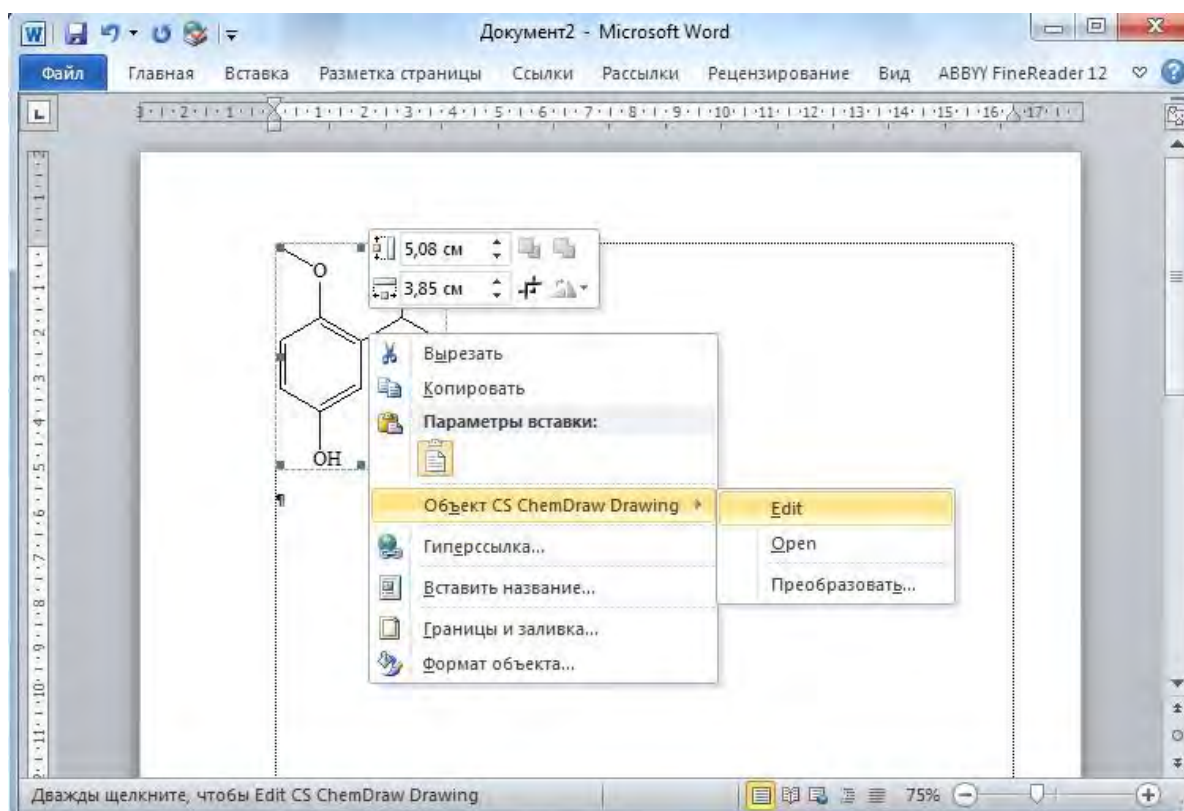


Рисунок 4.2 – Копіювання об'єктів із програми ChemDraw

При копіюванні хімічної формули або іншого об'єкту із робочого вікна програми ChemSketch об'єкт в документ Word вбудовується як об'єкт ChemSketch з можливістю подальшого редагування інструментами програми ChemSketch (рис. 4.3).

Вбудовування об'єктів хімічних редакторів MarvinSketch, ChemDraw та ChemSketch до програми Word можна зробити за інший спосіб. Всі ці програми надають можливість зберегти результати роботи у файлі одного із форматів *.jpg, *.pdf, *.tif, *.png. Надалі такі файли можуть бути вставлені до документу Word через активацію команди **Вставка/Рисунок** (рис. 4.4). Але слід зауважити, що такі об'єкти не підлягають подальшому редагуванню, яке іноді буває вкрай необхідним.

До програми Word можна вбудовувати графічні об'єкти із файлів формату *.cdx. Файли такого формату можуть бути створені хімічними редакторами MarvinSketch, ChemDraw та ChemSketch. Для цього спочатку треба зберегти результати роботи у хімічному редакторі у файлі формату *.cdx. Потім в програмі Word після активації команди **Вставка/Об'єкт/Створення із файлу** у діалоговому вікні вказати шлях до файлу і натиснути кнопку **Вставити** (рис. 4.5).

Вбудовування даних файлів формату *.cdx до програми Word можна зробити також простим перетягуванням файлу із вікна **Провідника Windows** до вікна відповідного текстового документу програми Word.

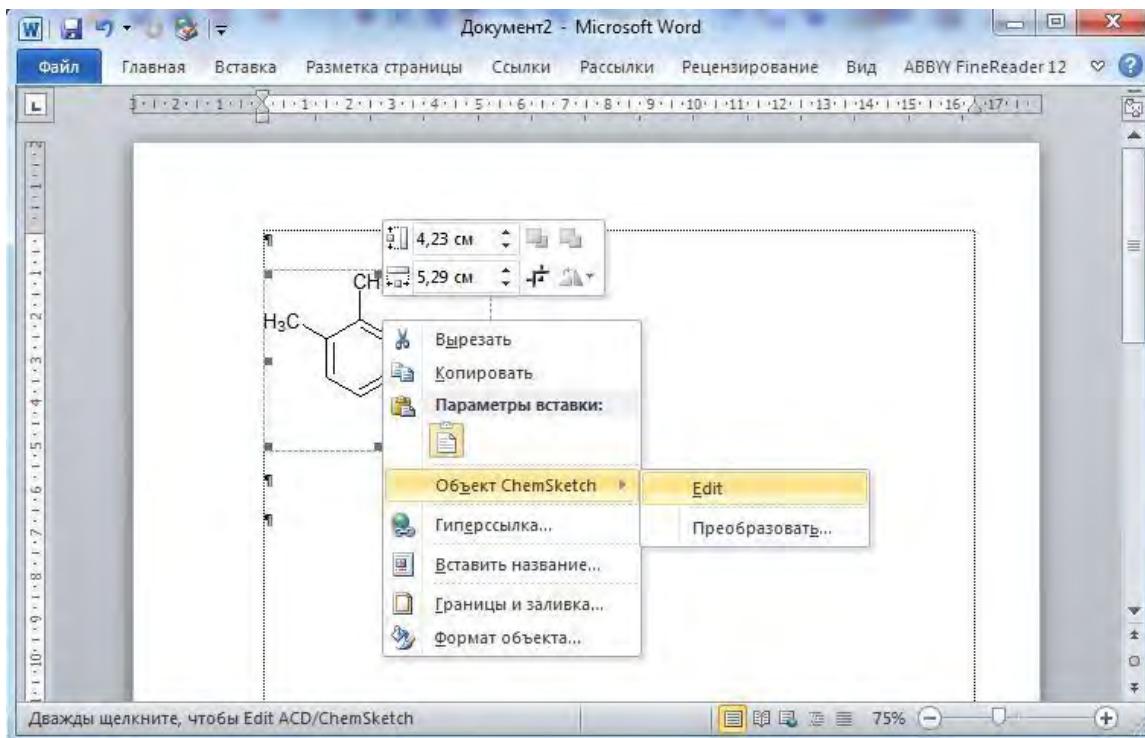


Рисунок 4.3 – Копіювання об'єктів із програми ChemDraw

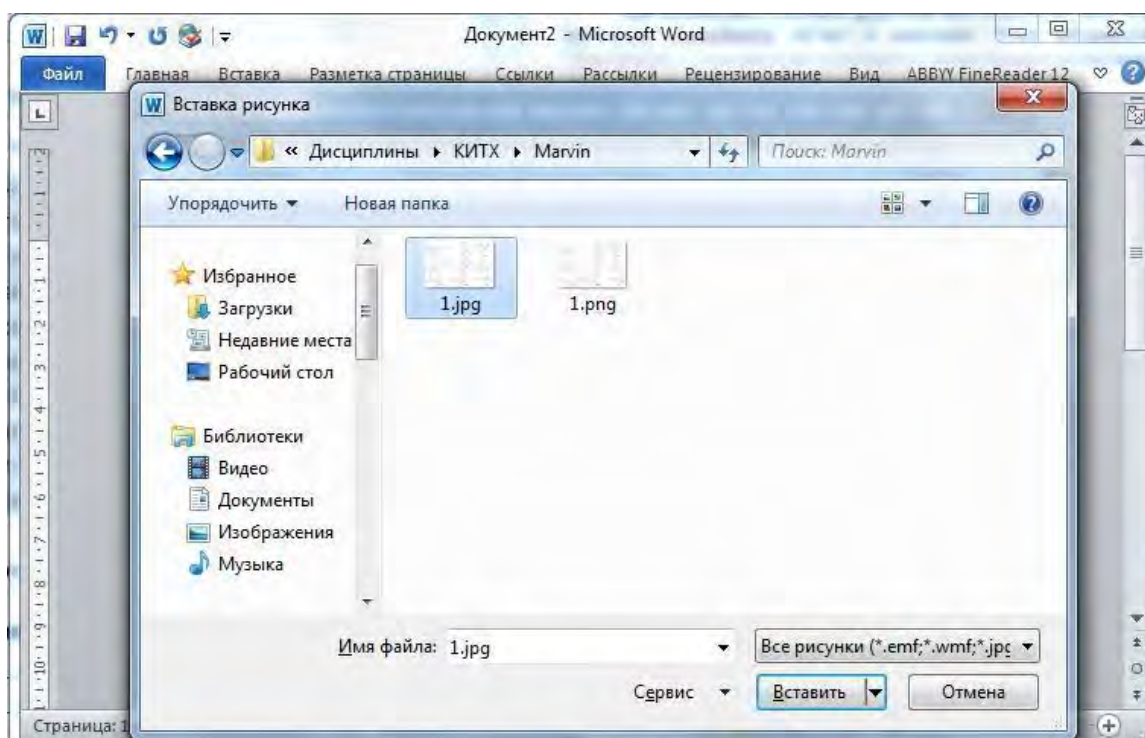


Рисунок 4.4 – Копіювання об'єктів із хімічних редакторів до програми Word у вигляді рисунків

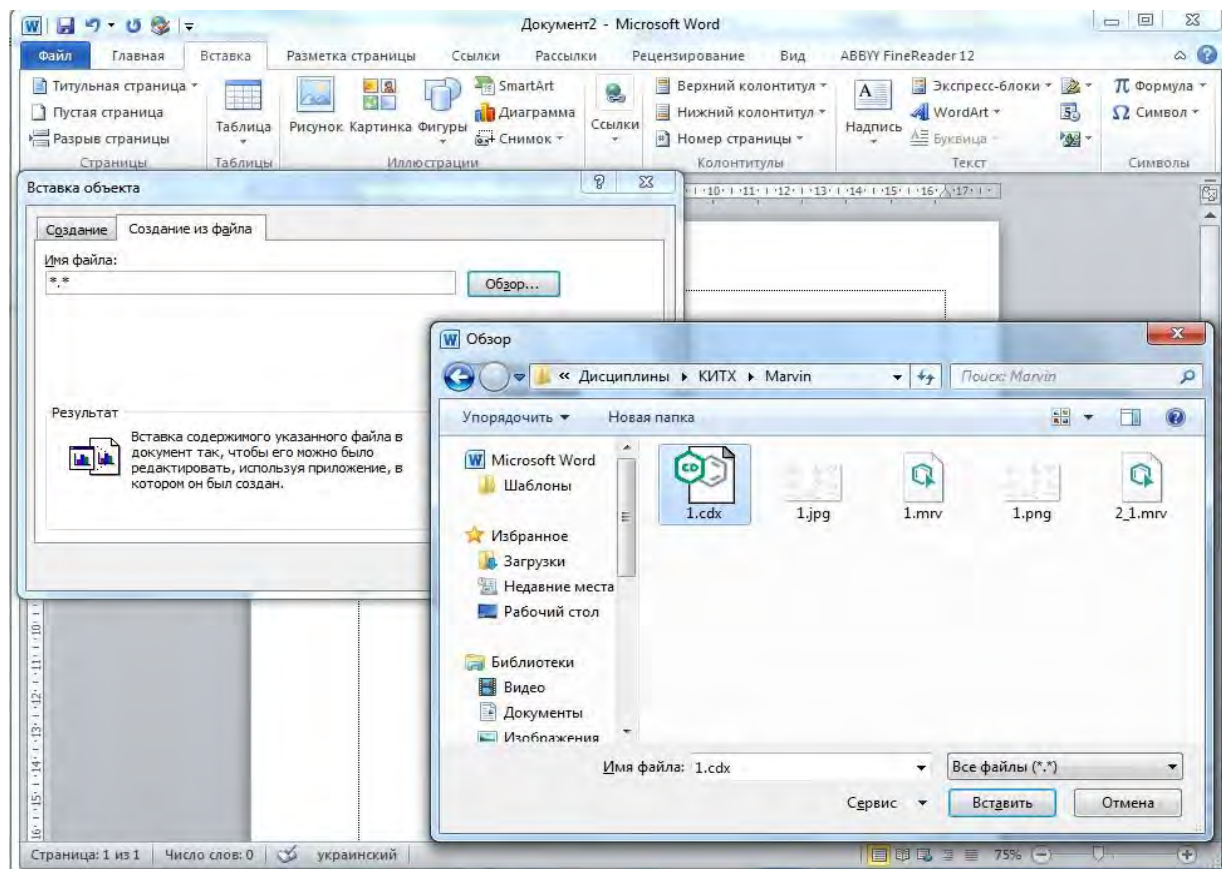


Рисунок 4.5 – Вбудовування даних файлів формату *.cdx до програми Word

Усі програми MarvinSketch, ChemDraw та ChemSketch надають можливість копіювати як графічні об'єкти, так і текстову інформацію.

Microsoft Excel (повна назва Microsoft Office Excel) – табличний процесор, програма для роботи з електронними таблицями.

Завдяки тому, що лист Excel являє собою готову таблицю, Excel часто використовують для створення документів без усіляких розрахунків, що просто мають табличне представлення.

У Excel легко можна створювати різні види графіків і діаграм, що досить часто необхідно при аналізі результатів досліджень в хімії, або при статистичній обробці даних.

Excel містить багато математичних і статистичних функцій, завдяки чому його можуть використовувати школярі і студенти для розрахунків курсових, лабораторних робіт.

Excel може навіть працювати як база даних. Хоча, звичайно, до повноцінної бази даних йому далеко.

Принцип вбудовування об'єктів із програм MarvinSketch, ChemDraw та ChemSketch до листів програми Excel такий самий як і у випадку програми Word. Але Excel дозволяє значно простіше у порівнянні з Word оформити необхідні дані у вигляді таблиць, особливо, за необхідності виконання будь-яких розрахунків і будовання діаграм.

Аналогічний принцип копіювання використовується при вбудовуванні графічних об'єктів і текстової інформації із програм MarvinSketch, ChemDraw та ChemSketch до програми підготовки презентацій Microsoft PowerPoint і програми

для управління базами даних (СУБД) Microsoft Access.

При копіюванні із програми MarvinSketch слід враховувати, що подальше редагування об'єкту буде неможливим. За необхідності внесення правок всі виправлення треба робити у вікні програми MarvinSketch і знову копіювати новий об'єкт до програми пакету Microsoft Office.

Порядок виконання роботи

При виконанні завдань цієї роботи необхідно використовувати графічні формули хімічних сполук, побудовані у лабораторній роботі № 2, і 3D-моделі, згенеровані у лабораторній роботі № 3.

Завдання 1. Інтеграція даних, отриманих в програмі MarvinSketch, до програми Word.

У текстовому документі необхідно оформити заголовок – «Інтеграція даних, отриманих в програмі MarvinSketch, до програми Word».

Дані, отримані в програмі MarvinSketch в лабораторній роботі № 2, треба інтегрувати до текстового документу Word і представити двома способами на окремих сторінках:

- 2) сторінка 1 – у форматі тексту з графічними об'єктами (рис. 2.1);
- 3) сторінка 2 – у форматі рисунку (рис. 2.1).

Результати роботи необхідно зберегти у файлі з назвою Прізвище_Рік_Laba_4_1 у форматі *.docx (наприклад, **Ivanov_2021_Laba_4_1.docx**).

Завдання 2. Інтеграція даних, отриманих в програмі ChemDraw, до програм Word та Excel.

У текстовому документі Word необхідно оформити заголовок – «Інтеграція даних, отриманих в програмі ChemDraw, до програми Word».

Дані, отримані в програмі ChemDraw в лабораторній роботі № 2, треба інтегрувати до текстового документу Word і представити у форматі таблиці з колонками: Структурна формула; Назва за ІЮПАК; SMILES; SLN; Брутто-формула; Молярна маса; Елементний склад. В колонці «Структурна формула» необхідно розмістити графічні об'єкти – структурні формули відповідних сполук.

Результати роботи необхідно зберегти у файлі з назвою Прізвище_Рік_Laba_4_2 у форматі *.docx (наприклад, **Ivanov_2021_Laba_4_2.docx**).

На аркуші книги у програмі Excel необхідно оформити заголовок – «Інтеграція даних, отриманих в програмі ChemDraw, до програми Excel».

Дані, отримані в програмі ChemDraw в лабораторній роботі № 2, треба інтегрувати до програми Excel і представити у форматі таблиці з колонками: Структурна формула; Назва за ІЮПАК; SMILES; SLN; Брутто-формула; Молярна маса; Елементний склад. В колонці «Структурна формула» необхідно розмістити графічні об'єкти – структурні формули відповідних сполук.

Результати роботи необхідно зберегти у файлі з назвою Прізвище_Рік_Laba_4_2 у форматі *.xlsx (наприклад, **Ivanov_2021_Laba_4_2.xlsx**).

Завдання 3. Інтеграція даних, отриманих в програмі ChemSketch, до програми Power Point.

У програмі Power Point треба створити спочатку слайд з назвою «Інтеграція даних, отриманих в програмі ChemSketch, до програми Power Point», а потім

презентацію.

На слайдах необхідно у форматі презентації представити дані, отримані в лабораторних роботах № 2 і 3, для сполуки, вказаної викладачем. Дані треба інтегрувати у форматах з можливістю подальшого редагування. На слайді повинні бути наведені всі необхідні пояснення (підписи типів молекулярних моделей, підписи даних і т. ін.).

На слайді також треба представити рівняння реакції за участю цієї сполуки (за вказівкою викладача).

Результати роботи необхідно зберегти у файлі з назвою Прізвище_Рік_Laba_4_3 у форматі *.pptx (наприклад, **Ivanov_2021_Laba_4_3.pptx**).

Контрольні питання

1. Наведіть методи інтегрування об'єктів, створених програмами MarvinSketch, ChemDraw та ChemSketch, до програми Word.
2. Які методи інтегрування об'єктів до програми Word надають можливість подальшого редагування об'єктів інструментами хімічних редакторів?
3. Який формат файлів, створених програмами MarvinSketch, ChemDraw та ChemSketch, дозволяє інтеграцію даних із цих файлів до програми Word і подальше редагування об'єктів?
4. Яким чином можна інтегрувати результати роботи у хімічних редакторах до програми Word у форматі рисунку?

Лабораторна робота № 5.

Пошук даних у хімічних базах даних і каталогах. Пошук інформації у наукометричних та патентних базах даних.

Мета роботи: оволодіти основними прийомами пошуку хімічної інформації для заданої хімічної сполуки в електронних хімічних базах і каталогах. Оволодіти основними прийомами пошуку необхідної інформації у наукометричних та патентних базах даних.

Питання для самоконтролю

1. Типи ідентифікаторів хімічних сполук.
2. Хімічні бази даних і каталогів.
3. Які переваги і недоліки пошуку інформації у ресурсі PubChem?
4. Організація пошуку літературної інформації у ресурсах бази даних PubChem?
5. Структурні характеристики хімічних сполук доступні для пошуку в базі даних PubChem.
6. Переваги і недоліки пошуку інформації у ресурсі ChemSpide.
7. Як організувати пошук фізико-хімічної інформації у ресурсах бази даних ChemSpider?
8. Інформація про хімічні сполуки. Види. Характеристика. Основні показники.
9. Особливість ресурсу Organic Syntheses.

Теоретичні відомості

Інтернет – величезне джерело практично будь-якої інформації. Існують сотні мільйонів веб-сторінок, частина яких цікава для хіміків-органіків, біоорганіків, біохіміків і спеціалістів суміжних галузей науки. Понад 80 % інформації, доступної в світовому Інтернеті, є англomовною (а в галузі науки й технології цей відсоток ще вищий). Відповідно, переважна більшість веб-ресурсів для спеціалістів у галузі хімічних наук також англomовні.

Більшість баз даних хімічного характеру (властивості молекул, методи синтезу, відповідна література й патенти тощо) в мережі Інтернет є комерційними. Найвідоміші з них – *Beilstein*, *SciFinder*, *STN*. Безумовно, бази вільного доступу навряд чи здатні конкурувати з ними в повному обсязі й не містять такої багатой інформації. Однак в Інтернеті багато ресурсів цього класу з вільним доступом. Серед безоплатних баз слід відмітити

– **PubChem** (<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov>) – це відкрита база даних хімії Національного інституту охорони здоров'я (NIH). Користувачі можуть розміщувати свої наукові дані в PubChem, щоб інші могли їх використовувати. База містить інформацію про хімічні структури, ідентифікатори, хімічні та фізичні властивості, біологічні дії, патенти, дані про здоров'я, безпеку, токсичність та багато інших;

– **ChemSpider** (<http://www.chemspider.com>) – це безкоштовна база даних хімічних структур, що забезпечує швидкий текстовий та структурний пошук серед понад 67 мільйонів структур із сотень джерел даних;

– **NIST Chemistry WebBook** (<https://webbook.nist.gov/chemistry/>) дозволяє вести пошук фізико-хімічних властивостей молекул (за назвою, структурою, CAS

індексом, молекулярною формулою тощо); при цьому надаються термодинамічні характеристики, а в багатьох випадках навіть УФ, ІЧ і мас- спектри сполук, зібрані NIST в рамках Стандартної програми довідкових даних;

– **Chemical Entities of Biological Interest (ChEBI)** (<https://www.ebi.ac.uk/chebi/>) – це вільно доступна база молекулярних сполук, орієнтована на «малі» хімічні сполуки. ChEBI використовує номенклатуру, символіку та термінологію, затверджені IUPAC (International Union of Pure and Applied Chemistry) та NC-IUBMB (International Union of Biochemistry and Molecular Biology). Усі дані в базі є невласними або отримані з непатентованого джерела, тому база є вільнодоступною для кожного користувача (дані на цьому веб-сайті доступні за ліцензією Creative Commons (CC BY 4.0)). Кожен елемент бази даних повністю відстежується і чітко посилається на першоджерело;

– **Common Chemistry from Chemical Abstracts Service (CAS)** (<http://www.commonchemistry.org/>) – веб-ресурс, який містить номери реєстру CAS для приблизно 7 900 хімічних речовин, що мають широкий загальний громадський інтерес;

– **SDBS – Spectral Database System For Organic Compounds** (https://sdfs.db.aist.go.jp/sdfs/cgi-bin/cre_index.cgi) є інтегрованою системою спектральних даних для органічних сполук;

– **eMolecules** (<https://www.emolecules.com/>) дозволяє знайти фізико-хімічні дані молекул за структурою, а також інформацію про виробників цих сполук (у базі понад 7 млн структур);

– **ChemIDplus A TOXNET DATABASE of National Library of Medicine** (<https://toxnet.nlm.nih.gov/>) – ресурс для пошуку баз даних про токсикологію, небезпечні хімічні речовини, екологічне здоров'я та токсичні викиди (16 грудня 2019 року інформація Національної бібліотеки медицини (NLM) TOXNET перенесена на PubChem, PubMed та Bookshelf);

– **Organic Syntheses** (<http://www.orgsyn.org/>) дозволяє отримати методи синтезу й використання в синтезі сполук як за ключовими словами, так і за структурою (із застосуванням плагіну ChemDraw);

– **Merck** (<https://www.sigmaaldrich.com/european-export.html>) – онлайн-вий хімічний каталог, який дозволяє здійснювати швидкий структурний і текстовий пошук хімічних сполук і який містить багато корисної для хіміків інформації.

Ресурс PubChem

Ресурс PubChem (<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov>) дозволяє здійснювати швидкий структурний пошук а також прогнозування біологічної активності органічних сполук.

Інформаційний пошук в цієї базі можна здійснювати

- за 1D-ідентифікаторами (систематична назва, назва за номенклатурою ІЮПАК, лінійні коди);
- за реєстраційним номером сполуки;
- за точною структурною формулою, яка вводиться за допомогою відповідного аплету (рис. 5.1).

Також для вказаної структури виконується пошук літературних джерел (статті, книги, патенти), фізико-хімічних даних, структурної, спектральної інформації, тощо.

Результати пошуку даних про хімічну речовину (див. рис. 5.1 – активна опція *Compounds* нижче пошукової строки) мають вигляд, наведений на рисунку 5.2.

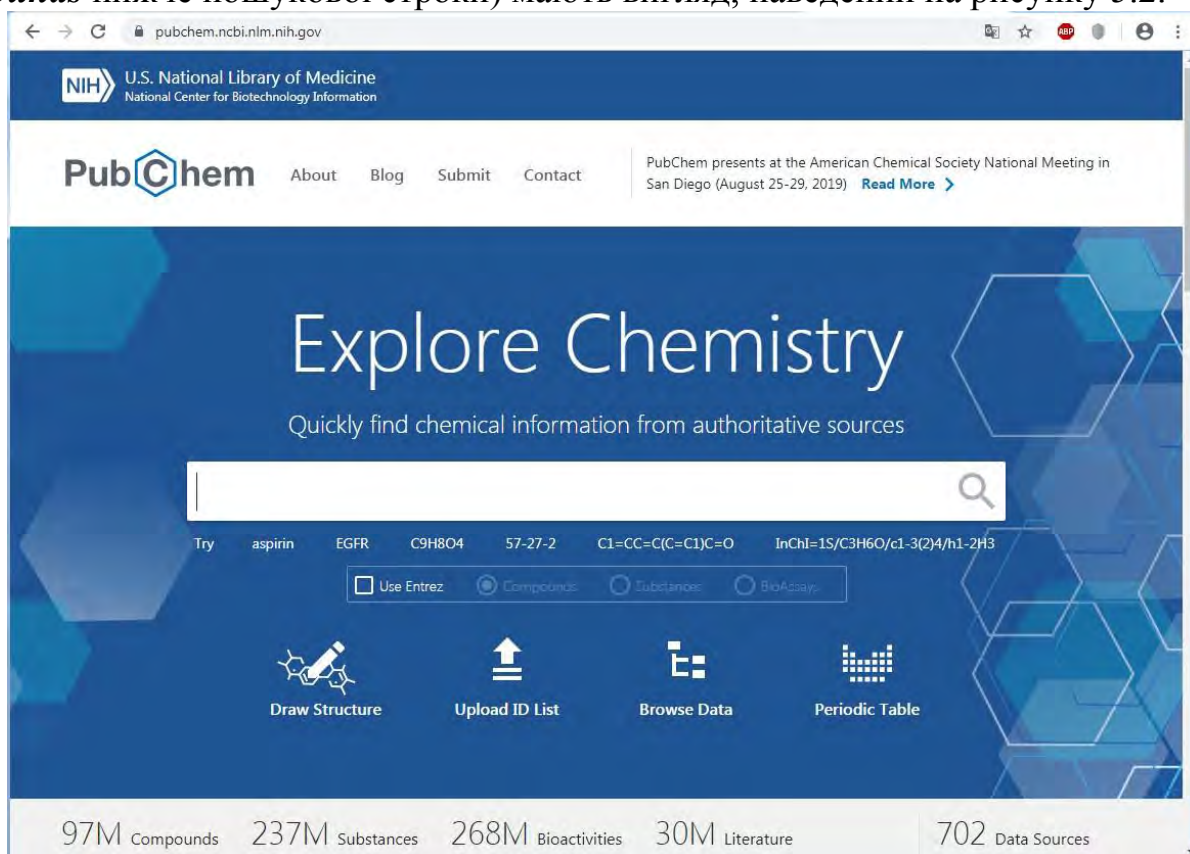


Рисунок 5.1 – Вікно пошуку ресурсу PubChem

Рисунок 5.2 – Результати пошуку за SMILES кодуванням

Наприкінці сторінці з результатами пошуку за посиланням **Summary** (див. рис. 5.2) знаходиться докладна інформація про дану сполуку із вказівкою джерел даних за наступними категоріями (рис. 5.3):

1. структури;
2. імена та ідентифікатори;
3. хімічні та фізичні властивості;
4. спектральна інформація;
5. суміжні записи;
6. постачальники хімічних сполук;
7. інформація про ліки та медикаменти;
8. агрохімічна інформація;
9. фармакологія та біохімія;
10. використання та виготовлення;
11. ідентифікація;
12. безпека та небезпека;
13. токсичність;
14. література;
15. патенти;
16. біомолекулярні взаємодії та шляхи;
17. результати біологічних випробувань;
18. класифікація;
19. джерела інформації.

The image shows a screenshot of the PubChem website's Compound Summary page for Acetaminophen. The page is titled "COMPOUND SUMMARY" and "Acetaminophen". It includes the following information:

- PubChem CID: 1983
- Structure: 2D, 3D, and Crystal representations.
- Chemical Safety: Iritant hazard symbol and "Laboratory Chemical Safety Summary (LCSS) Datasheet".
- Molecular Formula: $C_8H_9NO_2$ or $HOOC_6H_4NHCOCH_3$
- Synonyms: acetaminophen, 4-Acetamidophenol, Paracetamol, 103-90-2, N-(4-Hydroxyphenyl)acetamide.
- Molecular Weight: 151.16 g/mol
- Dates: Modify: 2019-11-02, Create: 2004-09-16

On the right side, there is a "CONTENTS" menu with the following items:

- 1 Structures
- 2 Names and Identifiers
- 3 Chemical and Physical Properties
- 4 Spectral Information
- 5 Related Records
- 6 Chemical Vendors
- 7 Drug and Medication Information
- 8 Agrochemical Information
- 9 Pharmacology and Biochemistry
- 10 Use and Manufacturing
- 11 Identification
- 12 Safety and Hazards
- 13 Toxicity
- 14 Literature
- 15 Patents
- 16 Biomolecular Interactions and Pathways
- 17 Biological Test Results
- 18 Classification
- 19 Information Sources

Рисунок 5.3 – Інформація про хімічну сполуку, що міститься за посиланням

Summary

Кожна категорія даних містить відповідну інформацію. Категорії, для яких дані відсутні, на сторінці результатів пошуку не наводяться. Наприклад, результати пошуку даних для N-(2,5-dimethyl-4-oxocyclohexa-2,5-dien-1-ylidene)benzamide містять дані в категоріях (рис. 5.4)

- структури;
- імена та ідентифікатори;
- хімічні та фізичні властивості;
- суміжні сполуки;
- постачальники хімічних речовин;
- література;
- джерела інформації.

NIH U.S. National Library of Medicine
National Center for Biotechnology Information

PubChem About Blog Submit Contact

Search PubChem

COMPOUND SUMMARY

N-(2,5-Dimethyl-4-oxocyclohexa-2,5-dien-1-ylidene)benzamide

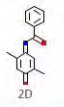
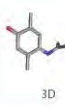
Share Tweet Email

Cite Download

CONTENTS

- Title and Summary
- 1 Structures
- 2 Names and Identifiers
- 3 Chemical and Physical Properties
- 4 Related Records
- 5 Chemical Vendors
- 6 Literature
- 7 Information Sources

PubChem CID: 4483788

Structure:  

Find Similar Structures

Molecular Formula: C₁₅H₁₃NO₂

Synonyms: N-(2,5-dimethyl-4-oxocyclohexa-2,5-dien-1-ylidene)benzamide
AC1NAWIW
ZINC16779797
AKOS002271847
ST50168328
[More...](#)

Molecular Weight: 239.27 g/mol

Dates: Modify: 2019-11-09 Create: 2005-09-15

Рисунок 5.4 – Результати пошук інформації про N-(2,5-dimethyl-4-oxocyclohexa-2,5-dien-1-ylidene)benzamide за SMILES кодуванням

Ресурс ChemSpider

Ресурс ChemSpider (<http://www.chemspider.com>) являє собою безкоштовну базу даних, яка відноситься до ресурсів Королівського хімічного товариства. Дозволяє здійснювати швидкий структурний і текстовий пошук, містить більше ніж 77 мільйонів записів. Має зв'язок із 276 базами даних. Нова інформація до бази ChemSpider додається майже щоденно. На даному етапі вона інтегрована з процесом публікації в системі RSC Publishing, тому інформація про нову сполуку додається відразу після публікації статті.

Інформаційний пошук можна здійснювати за ID-ідентифікаторами (систематична назва, назва за номенклатурою ІЮПАК, лінійні коди, реєстраційні номери сполуки), за точною структурною формулою, яка вводиться за допомогою відповідного апплету (рис. 5.5).

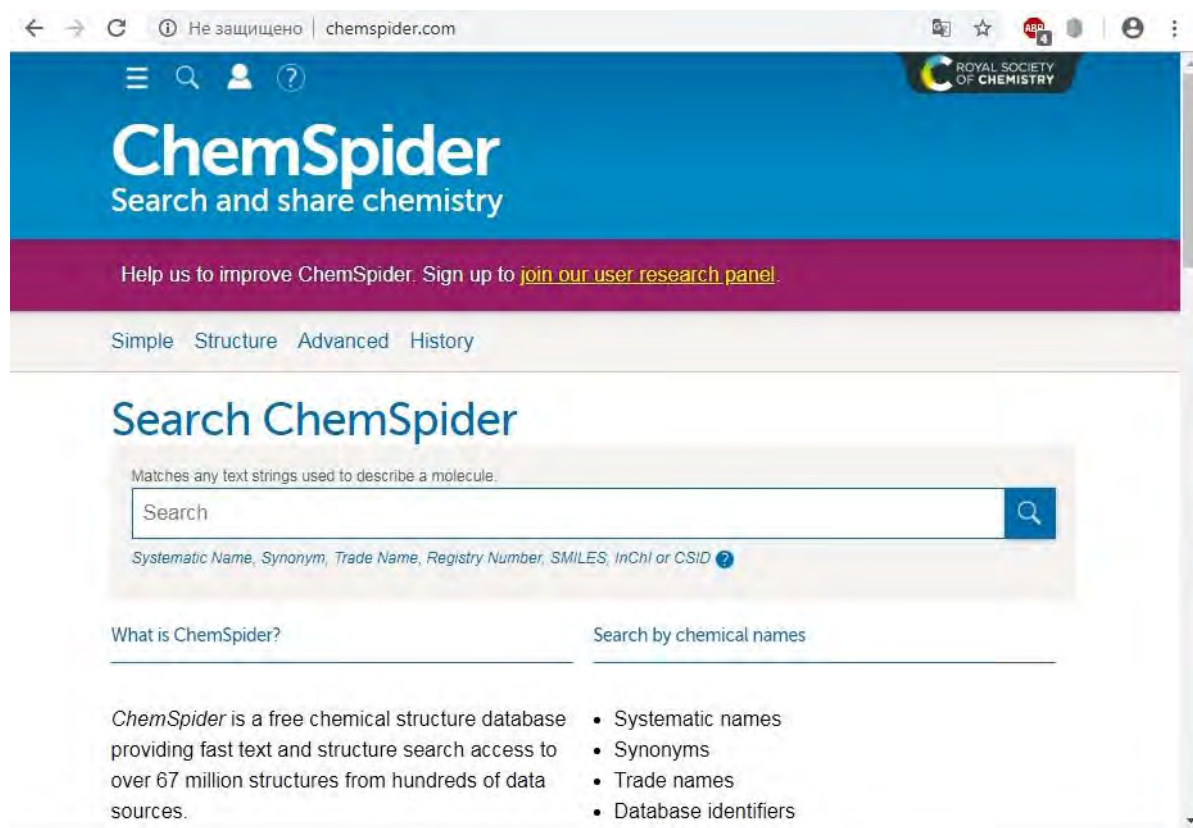


Рисунок 5.5 – Вікно пошуку ресурсу ChemSpider

Ресурс ChemSpider містить наступну інформацію про дану хімічну сполуку: назва за систематичною номенклатурою, відомі ідентифікатори та реєстраційні номери інших важливих електронних ресурсів (наприклад, CAS номер), фізичні та хімічні властивості сполуки, молекулярну структуру, спектральні дані, інформацію про токсичність, фармакологічні властивості, перелік бібліографічних посилань на статті у сучасних наукових літературних джерелах, патентах.

Результати пошуку даних парацетамолу, виконаного за SMILES кодуванням, наведені на рисунку 5.6.

Дані про сполуку наводяться на окремих вкладках (див. рис. 5.6): **Імена (Names)**; **Властивості (Properties)**; **Пошук (Searches)**; **Спектри (Spectra)**; **Виробники (Vendors)**; **Статті (Articles)**; **Інші (More)**.

Розширений пошук (рис. 5.7, а) можна проводити за ідентифікаторами, елементним складом, властивостями (експериментальними або розрахованими кількісними фізико-хімічними характеристиками), типом даних, типом джерел, за відомою структурною формулою за допомогою вбудованого апплету (рис. 5.7, б), тощо.

Found 1 result
Search term: Oc1ccc(NC(=O)C)cc1 (Found by conversion of search term to chemical structure (full match))

Paracetamol
Molecular Formula: $C_8H_9NO_2$
Average mass: 151.163 Da
Monoisotopic mass: 151.063324 Da
ChemSpider ID: 1906

Experimental Physico-chemical Properties

Experimental Melting Point:

- 168-172 °C SynQuest
- 169 °C TCI [H0190](#)
- 168-172 °C Alfa Aesar
- 169-172 °C Oxford University Chemical Safety Data (No longer updated) [More details](#)

Рисунок 5.6 – Результати пошуку даних парацетамолу

ChemSpider
Search and share chemistry

Simple Structure Advanced History

Advanced search

- Structure
- Identifier
- Elements
- Intrinsic Properties
- Calculated Properties
- Data Source
- Lasso Similarity
- Supplementary info
- Tags

FILTER Search Hits Limit: 100 CLEAR FORM SEARCH

а)

Draw structure Convert structure Load structure

Use our editor to draw your structure

CLEAN

Search options

Exact Substructure Similarity

- Exact Match
- All Tautomers
- Same Skeleton (Including H)
- Same Skeleton (Excluding H)
- All Isomers

б)

а – вікно розширеного пошуку;
б – вікно пошуку за відомою структурною формулою Рисунок 5.7 – Розширений пошук у системі ChemSpider

На вкладці *Історія (History)* сторінки пошуку (див. рис. 5.5) наводиться

перелік пошуків, виконаних у даній системі, результати яких можна переглянути.

Пошук даних в системі ChemSpider може бути також виконаний на мобільних пристроях за допомогою безкоштовних додатків для iOS (iPhone / iPod / iPad) і для Android.

Ресурс Organic Syntheses

Ресурс Organic Syntheses – це електронна версія наукового журналу «Organic Syntheses», який видається з 1921 року. Organic Syntheses (<http://www.orgsyn.org/>) надає хімічній спільноті детальні, надійні та ретельно перевірені процедури синтезу органічних сполук. Деякі процедури описують практичні методи приготування конкретних цікавих сполук, а інші процедури ілюструють важливі синтетичні методи із загальною корисністю. Кожна процедура, наведена в базі, написана значно детальніше порівняно з типовими експериментальними процедурами в інших журналах.

Перевагою цієї бази є те, що кожна реакція з її характеристичними даними була повторена кілька разів і ретельно "перевірена" на відтворюваність у лабораторіях членів Ради редакторів цього ресурсу. Ресурс Organic Syntheses публікується некомерційною корпорацією Organic Syntheses, Inc.

До 1998 року «Органічні синтези» виходили лише як щорічний друкований випуск. Але з 1998 року всі томи журналу стали доступними на веб-сайті з відкритим доступом, а нові статті публікуються в Інтернеті, як тільки вони приймаються.

На головній сторінці ресурсу Organic Syntheses доступний швидкий пошук за структурою, за назвою або за вихідними даними методики синтезу (рис. 5.8).

При активації команди **Display References** на запит користувача (наприклад, за структурною формулою, рис. 5.9) система надає перелік синтезів, в яких дана або аналогічна за структурою речовина являється або вихідною сполукою, або кінцевим продуктом, або інтермедіатом (рис. 5.10).

При активації команди **Display Compounds** на запит користувача система надає перелік структур хімічних сполук, які мають схожу структурну формулу або містять в своїй структурі фрагмент запиту (рис. 5.11). Для кожної сполуки при цьому вказано її номер реєстру CAS (якщо він є) і надається посилання на відповідні синтези, в яких дана сполука являється або вихідною сполукою, або кінцевим продуктом, або інтермедіатом.

Кожну методику синтезу, надану системою, можна переглянути у форматі PDF або HTML. Кожна методика має ідентифікаційний номер DOI (рис. 5.12).

Organic Syntheses

A Publication of Reliable Methods for the Preparation of Organic Compounds

Search Citation Search Text

Annual Volume Page GO

Home Search For Authors Submission About OrgSyn Safety Grants/Programs Contact OrgSyn

The Org Syn Mobile App

Organic Syntheses is pleased to announce the Org Syn Mobile App for iOS (iPhone and iPad). Download for free from the App Store (follow the link <https://itunes.apple.com/us/app/id1087152400> or search for "Organic Syntheses")

Board of Editors

Kevin R. Campos
Merck Research Laboratories

All procedures and characterization data in OrgSyn are peer-reviewed and checked for reproducibility in the laboratory of a member of the Board of Editors

Volume 96 (2019)

Zoom Articles Display

Toggle all articles expanded

Discussion Addendum for: Fluorobis(phenylsulfonyl)methane (FBSM)

Xianath Lopez-Rodriguez, Vinayak Krishnamurli, Mathew Coe and G. K. Surya Prakash
Org. Synth. 2019, 96, 474
DOI: 10.15227/orgsyn.096.0474

Collapse | PDF | Rich HTML

Preparation of 2,4,5,6-Tetra(9H-carbazol-9-yl)isophthalonitrile

Saskia M. Engle, Takisha R. Kirkner, and Christopher B. Kelly
Org. Synth. 2019, 96, 455
DOI: 10.15227/orgsyn.096.0455

Collapse | PDF | Rich HTML

QUICK NAVIGATION

Select Ann. Volume GO

Select Coll. Volume GO

QUICK SEARCH

Display References Display Compounds

Type text query here...

Click to draw a structure

Search

Рисунок 5.8 – Головна сторінка Organic Syntheses із вікном пошуку

Substructure search

Close and continue GO

Grants/Programs Contact OrgSyn

Board of Editors

Chris Senanayake
Boehringer Ingelheim Pharmaceuticals

cedures and characterization data in are peer-reviewed and checked for ability in the laboratory of a member of the Board of Editors

QUICK NAVIGATION

Select Ann. Volume GO

Select Coll. Volume GO

QUICK SEARCH

Display References Display Compounds

Volume 96 (2019)

Zoom Articles Display

Discussion Addendum for:

Рисунок 5.9 – Запит пошуку за структурною формулою методик синтезу аналогів парацетамолу в системі Organic Syntheses

Organic Syntheses
A Publication of Reliable Methods for the Preparation of Organic Compounds

Search Citation Search Text
Annual Volume Page GO

Home Search For Authors Submission About OrgSyn Safety Grants/Programs Contact OrgSyn

Zoom Articles Display
Page: [First](#) [Prev](#) 1 - 8 of 8 [Next](#) [Last](#) [All \(100 max\)](#) Hits per page: 47

- GENERATION AND [2+2] CYCLOADDITIONS OF THIO-SUBSTITUTED KETENES: *trans*-1-(4-METHOXYPHENYL)-4-PHENYL-3-(PHENYLTHIO)AZETIDIN-2-ONE
Rick L. Danheiser, Ivaao Okamoto, Michael D. Lawlor, and Thomas W. Lee
Org. Synth. **2003**, 80, 165
DOI: 10.15227/orgsyn.080.01.60
[Expand](#) | [PDF](#) | [Rich HTML](#)
- LIPASE-CATALYZED KINETIC RESOLUTION OF ALCOHOLS VIA CHLOROACETATE ESTERS: (-)-(1*R*,2*S*)-*trans*-2-PHENYLCYCLOHEXANOL AND (+)-(1*S*,2*R*)-*trans*-2-PHENYLCYCLOHEXANOL
A. Schwartz, P. Madan, J. K. Whitesell, and R. M. Lawrence
Org. Synth. **1990**, 65, 1
DOI: 10.15227/orgsyn.069.0001
[Expand](#) | [PDF](#) | [Rich HTML](#)
- ABIETIC ACID
G. C. Harris and T. F. Sanderson
Org. Synth. **1952**, 32, 1
DOI: 10.15227/orgsyn.032.0001
[Expand](#) | [PDF](#) | [Rich HTML](#)
- 4-ETHYLPYRIDINE
Robert L. Frank and Paul V. Smith
Org. Synth. **1947**, 27, 38
DOI: 10.15227/orgsyn.027.0038
[Expand](#) | [PDF](#) | [Rich HTML](#)
- 2-NITRO-4-METHOXYANILINE
Paul E. Fanta and D. S. Tarbell
Org. Synth. **1945**, 25, 78
DOI: 10.15227/orgsyn.025.0078
[Expand](#) | [PDF](#) | [Rich HTML](#)
- m*-NITROPHENOL
R. H. F. Manske
Org. Synth. **1928**, 8, 80
DOI: 10.15227/orgsyn.008.0080
[Expand](#) | [PDF](#) | [Rich HTML](#)

Рисунок 5.10 – Результати пошуку в *Organic Syntheses* при активації команди *Display References*

Organic Syntheses
A Publication of Reliable Methods for the Preparation of Organic Compounds

Search Citation Search Text
Annual Volume Page GO

Home Search For Authors Submission About OrgSyn Safety Grants/Programs Contact OrgSyn

Page: [First](#) [Prev](#) 1 - 6 of 6 [Next](#) [Last](#) [All \(100 max\)](#) Hits per page: 20

CAS: 62-44-2

CAS:

CAS: 51-66-1

CAS:

CAS:

CAS: 94612-48-3

Page: [First](#) [Prev](#) 1 - 6 of 6 [Next](#) [Last](#) [All \(100 max\)](#) Hits per page: 20

Home | About OrgSyn | Contact Us | Follow Us via [RSS](#) [Twitter](#)

Published by Organic Syntheses, Inc.
ISSN 2333-3553 (online)
ISSN 0078-6209 (print)

We use cookies to help understand how people use our website.
By using our site, you agree to our use of cookies.
Copyright © 2019 | All Rights Reserved

This site is powered by
VPInformatics
Life Science Data Management

Рисунок 5.11 – Результати пошуку в *Organic Syntheses* при активації команди *Display Compounds*

Organic Syntheses
A Publication of Reliable Methods for the Preparation of Organic Compounds

Org. Synth. 1928, 8, 80
DOI: 10.15227/orgsyn.008.0080

m-NITROPHENOL
[Phenol, m-nitro-]

Submitted by R. H. F. Manske
Checked by H. T. Clarke and M. R. Brethen.

1. Procedure

In a 4-l. beaker is placed 210 g. (1.5 moles) of finely powdered *m*-nitroaniline (Note 1). A cold mixture of 450 cc. of water and 330 cc. of concentrated sulfuric acid is added with hand or mechanical stirring, and then about 800 g. of finely crushed ice. When a homogeneous mixture has resulted, a solution of 105 g. (1.52 moles) of sodium nitrite in 250 cc. of water is added rapidly over a period of eight to ten minutes at the bottom of the mixture through a separatory funnel (Note 2) until a permanent color is given to starch-iodide paper (about 25–30 cc. of nitrite solution remains unused). The temperature during diazotization should be maintained at 0–5°. Stirring is continued for five to ten minutes longer, and the solution allowed to settle for another five minutes. A heavy crystalline deposit of *m*-nitrobenzenediazonium sulfate settles at the bottom of the beaker, from which the supernatant liquid is decanted (Note 3).

While the diazotization is in progress, 1 l. of concentrated sulfuric acid is added to 750 cc. of water in a 5-l. round-bottomed flask and the mixture heated to boiling (160°) with a large ring burner. The liquor from the diazotization is then added from a separatory funnel at such a rate that the acid mixture boils very vigorously. About fifty minutes is required for this addition. The crystalline diazonium sulfate is then added in small portions at such a rate that the evolved nitrogen does not cause loss of material by excessive foaming. Boiling is continued for a few minutes longer, and the contents of the flask are poured into a large beaker (Note 4) set in running cold water, and vigorously stirred to obtain a homogeneous crystal magma.

NOTES

1. The *m*-nitroaniline used in these experiments was a commercial specimen of 98.4 per cent purity. A less pure specimen did not give a greatly decreased yield.
2. The addition of the sodium nitrite solution should be as rapid as possible. If it is too rapid, however, considerable foaming occurs.
3. The filtration of this solution is slow and usually unnecessary. Occasionally undetermined impurities are present, and then washing the diazonium salt with cold water by decantation, followed by filtration, becomes desirable.
4. In the first part of the addition the solution remains pale yellow to brown, but when the solution becomes saturated with the *m*-nitrophenol the *m*-nitrophenol separates as a dark oil which is not filtered off. The final volume of the solution is about 3.5 l. and the boiling temperature about 120°.
5. By using the same molecular proportions the following *m*-nitrophenols were prepared in equally good yields from the corresponding *m*-nitroanilines: 3-methoxy-5-nitrophenol and 2-nitro-4,6-xyleneol. For the first compound it is advisable to use slightly more ice in the diazotization and add the diazonium solution to a mixture of equal volumes of sulfuric acid and water.

REFERENCES/ENDNOTES
ARTICLE COMPOUNDS

Рисунок 5.12 – Приклад методики синтезу в Organic Syntheses

Порядок виконання роботи

Для виконання завдань цієї роботи необхідний доступ до мережі Інтернет.

Назви або структурні формули хімічних сполук для пошуку вказує студент.

Результати роботи треба оформити у вигляді текстового документу. На перший сторінці звіту треба навести назву лабораторної роботи, вказати групу, прізвище і ініціали студента.

Результати пошуку кожного завдання треба наводити з нової сторінки з вказівкою назви завдання і назв сполук, які були задані студентом.

Результати роботи необхідно зберегти у файлі з назвою Прізвище_Рік_Laba_5 у форматі *.docx (наприклад, **Ivanov_2021_Laba_5.docx**).

Завдання 1. Пошук даних у базі даних PubChem.

Відкрити у браузері пошукову сторінку бази даних **PubChem** (<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov>). Виконати наступні завдання:

- для **сполуки 1** знайти структурну формулу та номер CAS;
- для **сполуки 2** знайти експериментальну температуру плавлення або кипіння;
- для **сполуки 3** знайти експериментальні спектральні дані;
- для **сполуки 4** знайти дані щодо його токсичності;
- для **сполуки 5** знайти публікації щодо синтезу або хімічних властивостей цієї сполуки.

Завдання 2. Пошук даних у базі даних ChemSpider.

Відкрити у браузері пошукову сторінку бази даних **ChemSpider** (<http://www.chemspider.com>). Виконати наступні завдання:

- для **сполуки 1** знайти структурну формулу та номер CAS;
- для **сполуки 2** знайти експериментальну температуру плавлення або кипіння;
- для **сполуки 3** знайти експериментальні спектральні дані;

- для **сполуки 4** знайти дані щодо її токсичності;
- для **сполуки 5** знайти публікації щодо синтезу або хімічних властивостей цієї сполуки.

Порівняти результати пошуку і зробити висновок:

- яка база надає більш детальну інформацію про сполуку;
- яка база є більш зручною у використанні.

Завдання 3. Пошук методики синтезу у базі Organic Syntheses.

Відкрити у браузері головну сторінку бази **Organic Syntheses** (<http://www.orgsyn.org>).

Знайти можливі методики синтезу для **сполуки 6**. При наявності декількох методик синтезу порівняти їх і зробити висновок, яка з них є менш трудомісткою.

Контрольні питання

10. Назвіть відомі вам типи ідентифікаторів хімічних сполук.
11. Яку інформацію про хімічні сполуки можна знайти у хімічних базах даних і каталогах?
12. Які переваги і недоліки пошуку інформації у ресурсі PubChem?
13. Як організувати пошук літературної інформації у ресурсах бази даних PubChem?
14. Які структурні характеристики хімічних сполук доступні для пошуку в базі даних PubChem?
15. Які переваги і недоліки пошуку інформації у ресурсі ChemSpider?
16. Як організувати пошук фізико-хімічної інформації у ресурсах бази даних ChemSpider?
17. Яка база даних надає більш детальну інформацію про хімічні сполуки?
18. В чому полягає особливість ресурсу Organic Syntheses?

Короткі теоретичні відомості

Проблема точної ідентифікації автора наукової роботи не є новою у світі. Більшість імен протягом життя можуть змінюватися, хибно транслітеруватися. Щодня свій науковий доробок публікують у різноманітних наукових виданнях десятки науковців з однаковими прізвищами у різних країнах. До того ж, у міжнародних журналах наші автори іноді публікуються під різними варіантами свого прізвища (наприклад, Олійник – Oliynuk, Oliinyk, Oliynik). Через це при підрахунку цитувань робіт вчених міжнародними наукометричними базами виникає чимало плутанини та помилок. Вирішенням проблеми є використання унікального ідентифікатора авторів-науковців – ID (unique author identifier). **ID науковця** дозволяє:

- легко встановити, хто є автором конкретного документу;
- точно виміряти цитованість робіт окремих дослідників;
- полегшує процес оцінки продуктивності та впливовості конкретного автора;
- спрощує обробку та зберігання даних в одному місці;
- покращує видимість публікацій автора у глобальній мережі.

Існують різні системи унікальних ідентифікаторів науковців: міжнародні та національні, мультидисциплінарні та галузеві.

ResearcherID – міжнародна ідентифікаційна система, що дозволяє створити унікальний профіль дослідника, який містить відомості про його наукові публікації і

їх історії. У даний час є власністю Clarivate Analytics. Має наступний загальний вид: A-1234-2015, де А – літера латинського алфавіту, 1234 – значення від 001, до 9999, 2015 – рік реєстрації ідентифікатора.

Система була створена і введена в дію в січні 2008 року компанією Thomson Reuters. Вона забезпечує обмін даними між своєю базою даних і базою даних ORCID. Однак, суть цих двох ідентифікаторів, незважаючи на однакові цілі, різняться. ORCID не пов'язаний з якою-небудь базою даних в той час, як ResearcherID є інструментом, тісно пов'язаним з базою Web of Science, що значно розширює його можливості і дещо спрощує створення і підтримання профілю.

З 2016 року система підтримується компанією Clarivate Analytics. З 2019 року колишній ресурс researcherid.com скасований і розпочато перенесення інструментів на платформу **Publons**, яка надає інструменти рецензування наукових публікацій. Видача ResearcherID тепер можлива лише при наявності в профілі однієї або більше власних публікацій. Порожні профілі не можуть отримати ID. Авторам, що вже мали на момент переїзду на платформу Publons ідентифікатори, були розіслані запрошення. Зареєструватися в **Publons** можна за посиланням <https://publons.com/in/researcherid/>.

Профілі **ResearcherID** і **Publons** об'єдналися, щоб використовувати всі можливості систем *Web of Science*, *ResearcherID* і *Publons* за допомогою єдиного облікового запису.

Профіль **Publons** надає користувачеві наступні можливості:

- всі публікації автора легко імпортуються з Web of Science, ORCID або з іншого менеджера бібліографічних посилань (наприклад, EndNote, Zotero або Mendeley);
- надійні показники цитування, які автоматично оновлюються на основі даних Web of Science Core Collection, що містить понад 21 000 кращих світових журналів;
- перевірену історію рецензування і редагувань, засновану на партнерстві з тисячами наукових журналів;
- завантаження академічного звіту, в якому коротко описується вага науковця як автора, редактора та рецензента, який він можете використовувати для просування по службі та кар'єрних переговорів.

ORCID (<https://orcid.org/>) – це відкритий, некомерційний проект для створення і підтримки реєстру унікальних ідентифікаторів дослідників, прозорого способу ув'язки науково-дослідної діяльності та доступу до цих ідентифікаторів.

ORCID є унікальним завдяки своїй незалежності від наукових дисциплін і національних кордонів, а також взаємодії з іншими системами ідентифікації. Основною метою введення системи ORCID є можливість ідентифікації наукових робіт, написаних різними вченими з однаковими іменами та прізвищами. Ідентифікатор представляє собою 16-значне число, унікальне для кожного автора.

Обліковий запис ORCID включає в себе інформацію про ім'я вченого, його електронну адресу, назву організації та його дослідницьку діяльність. ORCID враховує необхідність контролю за поширенням цих даних і надає відповідні інструменти для управління рівнем приватності даних. Структура ідентифікатора ORCID ID являє собою номер з 16 цифр, узгоджений із стандартом ISO (ISO 27729). Крім цифр від 0 до 9 ідентифікатор може містити велику літеру X, що представляє число 10. ORCID ID відображається як адреса виду <http://orcid.org/xxxx-xxxx-xxxx-xxxx>.

На сьогодні членами ORCID є близько 300 організацій, зокрема, чимало авторитетних університетів та наукових видавництв. **ORCID** – одна з небагатьох систем, що *дозволяє пов'язати різні унікальні ідентифікатори автора*. Це є важливим, враховуючи кількість систем ідентифікації й те, що автор може бути зареєстрований у декількох з них.

Scopus Author ID – для авторів, які опублікували більше однієї статті, у **Scopus** (<https://www.elsevier.com/solutions/scopus>) створюються індивідуальні облікові записи – профілі авторів з унікальними ідентифікаторами авторів (**Author ID**). Ці профілі надають таку інформацію, як варіанти імені автора, перелік місць його роботи, кількість публікацій, роки публікаційної активності, галузі досліджень, посилання на основних співавторів, загальна кількість цитувань на публікації автора, загальна кількість джерел, на які посилається автор, індекс Хірша автора тощо. База даних надає користувачам можливість використання унікальних ідентифікаторів авторів для формування пошукових запитів та налаштування сповіщень (електронною поштою або через RSS) щодо змін у профілях авторів. Можливості пошуку авторів та обмеженого перегляду їх профілів доступні без наявності передплати на базу даних Scopus засобами **Scopus Author Preview** (<https://www.scopus.com/freelookup/form/author.uri>).

Для установ, співробітники яких опублікували більше однієї статті, в Scopus створюються профілі з унікальними ідентифікаторами установ – Scopus Affiliation Identifier. Ці профілі надають таку інформацію, як адреса установи, кількість авторів-співробітників установи, кількість публікацій співробітників, перелік основних назв видань, в яких публікуються співробітники установи, і діаграма тематичного розподілу публікацій співробітників установи. База даних Scopus надає широкі можливості отримання наукометрії і проведення автоматизованого аналізу видань. Інструмент Journal Analyzer дозволяє проводити розширений аналіз наукового рівня видань (в тому числі, порівняльний аналіз декількох видань) за чотирма основними показниками:

- загальне число статей, опублікованих у виданні протягом року;
- загальна кількість посилань на видання в інших виданнях протягом року;
- тренд року (відношення кількості посилань на видання до кількості статей, опублікованих у виданні);
- відсоток статей, що не були процитовані.

База даних Scopus в багатьох країнах є одним з головних джерел отримання наукометричних даних для проведення оціночних досліджень на державному та/або корпоративному рівні. Дані Scopus спочатку використовувалися в рейтингу провідних університетів світу Times Higher Education Supplement: World University Rankings (QS TopUniversities). Однак, в останні роки цей аналіз і рейтинг проводиться на основі бази даних Web of Science компанії Clarivate Analytics.

Індекс Хірша (h-індекс) – наукометричний показник, запропонований в 2005 році аргентино-американським фізиком Хорхе Хіршем з Каліфорнійського університету в Сан-Дієго.

Індекс Хірша пропонувався як кількісна характеристика продуктивності вченого, групи вчених, наукової організації або наукової спільноти країни в цілому, що оцінюється за кількістю публікацій і цитувань цих публікацій.

Індекс Хірша був розроблений як альтернатива класичним «індексам цитованості» – сумарному числу посилань на роботи вченого. Критерій засновано на сукупному обліку числа публікацій дослідника і числа цитувань цих публікацій. Вчений має індекс h , якщо h з його N статей цитуються як мінімум h раз кожна.

Наприклад, h -індекс дорівнює 10. Це означає, що вченим було опубліковано щонайменше 10 робіт, кожна з яких була процитована 10 і більше разів. При цьому кількість робіт, процитованих менше число раз, може бути будь-яким, і воно не дає вкладу в індекс Хірша. Таким чином, для досягнення високого індексу Хірша недостатньо мати багато публікацій і навіть високий індекс цитованості, а важливо, щоб частіше цитувалася як можна більша кількість опублікованих робіт. Тобто, h -індекс – це спроба дати комплексну оцінку одночасно числу публікацій вченого і їх цитованості (якості). Індекс Хірша був придуманий, як уніфікована оцінка ефективності праці вченого незалежно від сфери його досліджень.

Індекс Хірша може обчислюватися з використанням як безкоштовних загальнодоступних наукометричних баз даних в Інтернеті, так і баз даних з платної підпискою (наприклад, Scopus або ISI Web of Science). Однак платні бази даних часто теж розміщують h -індекс вчених у вільному доступі. Індекс Хірша, підрахований для одного і того ж науковця з використанням різних баз даних, буде різний, як і інші наукометричні характеристики. Він залежить від кількості наукових публікацій автора в виданнях, що увійшли до обраної бази даних. Крім того, індекс Хірша може обчислюватися з урахуванням і без урахування самоцитування; передбачається, що відкидання посилань авторів на власні статті дає більш об'єктивні результати. Наприклад, в рейтингу вчених України за індексом Хірша виконується підрахунок за даними бази Scopus з відкиданням самоцитування всіх авторів (тобто цитування статті 1 в статті 2 цієї статті не враховується, якщо хоча б один автор входить одночасно в список співавторів обох статей).

DOI (digital object identifier) <https://www.doi.org/> – ідентифікатор цифрового об'єкта, який присвоюється науковим статтям і збірникам.

У DOI може входити різна інформація, наприклад, адреса статті в Інтернеті (URL – Uniform Resource Locator), назва статті, автор, інформація про видання та інші метадані, які Ви повинні ретельно заповнити і перевірити ще раз при додаванні статей і збірок в Open Journal Systems.

З ідентифікаторами цифрових об'єктів (DOI) наукові журнали мають набагато більше шансів бути включеними та індексуватися в авторитетних міжнародних наукометричних базах даних Scopus і Web of Science.

Наукова періодика

На даний час, практично всі наукові журнали в тій чи іншій формі представлені в Інтернет. Основні варіанти представлення журналу:

- загальна інформація про журнал, бібліографія (зміст за томами і номерами);
- загальна інформація про журнал, бібліографія, реферати;
- загальна інформація про журнал, бібліографія, реферати, повні тексти статей (найчастіше в форматі PDF, який вимагає використання вільно поширюваного програмного забезпечення Adobe Acrobat Reader).

Загальна інформація про журнал, а також бібліографія і реферати найчастіше надаються безоплатно, а повні тексти статей (за винятком журналів відкритого доступу) – обмежено (в межах передплати або за окрему плату).

Інформація про журнали найчастіше розміщується на сайтах видавництв, в рамках яких ці журнали виходять у світ, або на сайтах наукових товариств і організацій відповідного спрямування. Тому найпростіший спосіб знайти в Інтернеті науковий журнал (якщо він там представлений) – звернутися до сервера організації, яка його видає.

Однак, якщо видавництво (або його Інтернет-адреса) невідомо, інформацію про присутність журналу в Інтернеті і відповідну веб-адресу можна отримати через довідкові сторінки періодичних видань в Інтернеті. Цими ж довідниковими сторінками (покажчиками або пошуковими системами) можна скористатися, якщо треба знайти видання з певної тематики.

Але більш раціональним є пошук необхідної бібліографічної інформації за допомогою спеціалізованих наукометричних баз, зокрема, Scopus.

Доступ до міжнародної наукової бази даних Scopus можливий для користувачів внутрішньої мережі Академії за адресою – <https://www.scopus.com/search/form.uri?display=basic>. Система автоматично відкриває вкладку пошуку *Document search (Поиск документов)* (рис. 6.1).

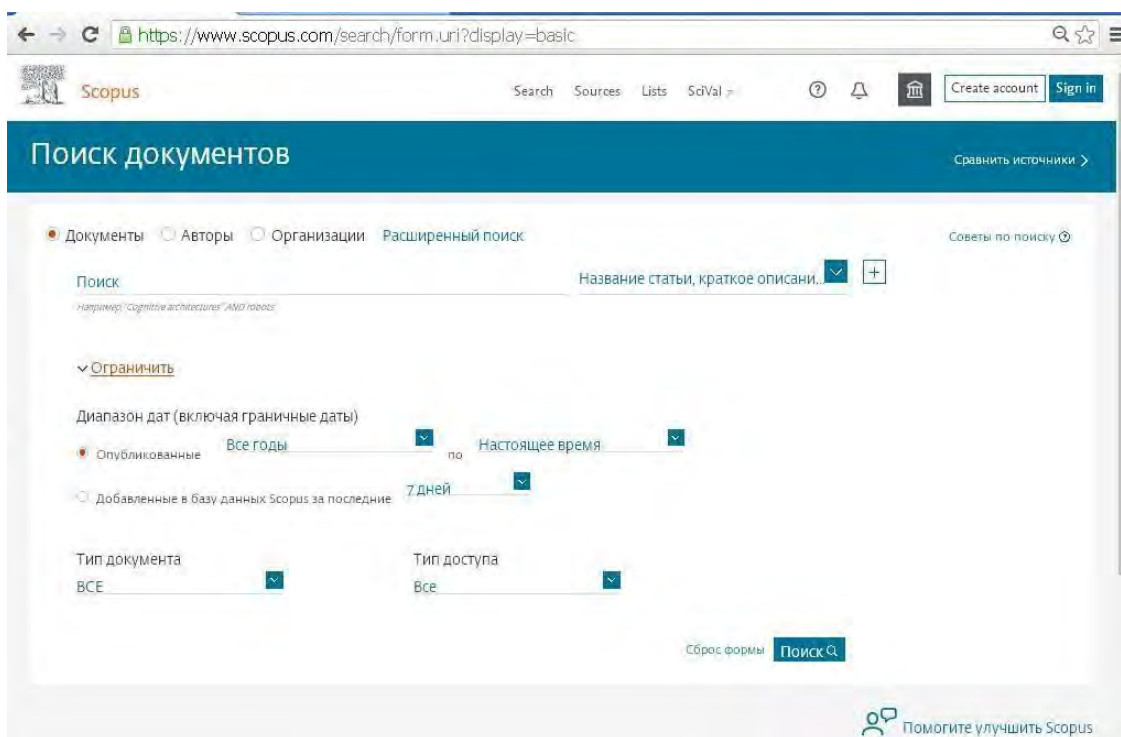


Рисунок 6.1 – Робоче вікно пошуку документів бази даних Scopus

Scopus пропонує кілька видів пошуку:

- пошук документів;
- пошук авторів;
- пошук організації;
- розширений пошук.

При пошуку документів можна задати декілька ключових запитів, розділивши їх оператором AND (рис. 6.2). Можна також вибрати критерії пошуку (див. рис. 6.2):

- **Все поля;**

- **Название статьи, краткое описание, ключевые слова;**
- **Авторы;**

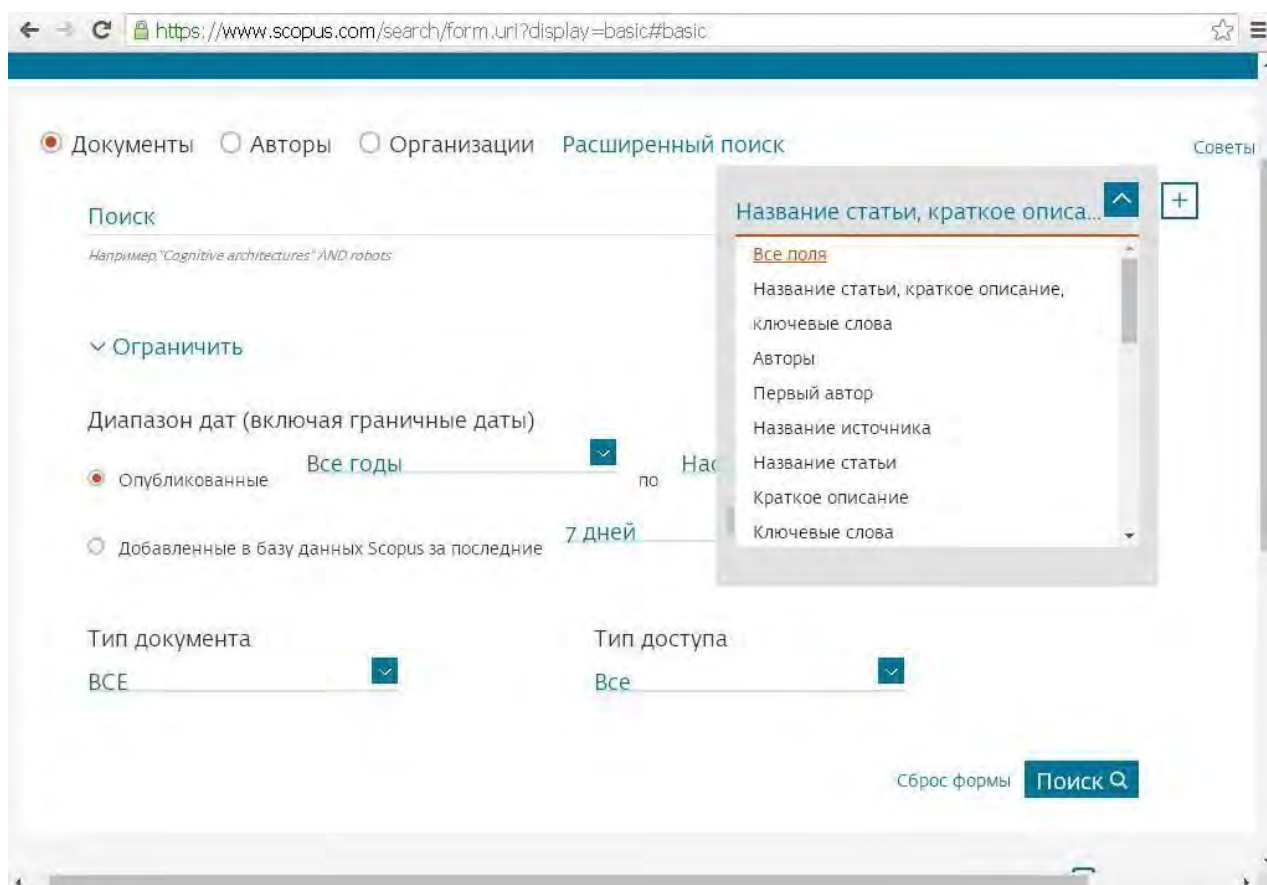


Рисунок 6.2 – Вікно пошуку документів бази даних Scopus

Первый автор і т.д. Можна ввести обмеження щодо року видання, строку додавання запису в Scopus, типу документу (наприклад, **все; стаття; стаття или обзор, обзор, книга** і т. і.).

Пошук здійснюється натисканням кнопки **Поиск** (див. рис. 6.2).

На сторінці результатів пошуку (рис. 6.3) в лівій колонці можна уточнити результати – обмежити або виключити певні дані за наступними параметрами: **тип доступу, рік, автор, галузь знань, тип документу** та ін. Сторінка результатів пошуку містить декілька вкладок (рис. 6.3):

- **Documents;**
- **Secondary documents;**
- **Patents.**

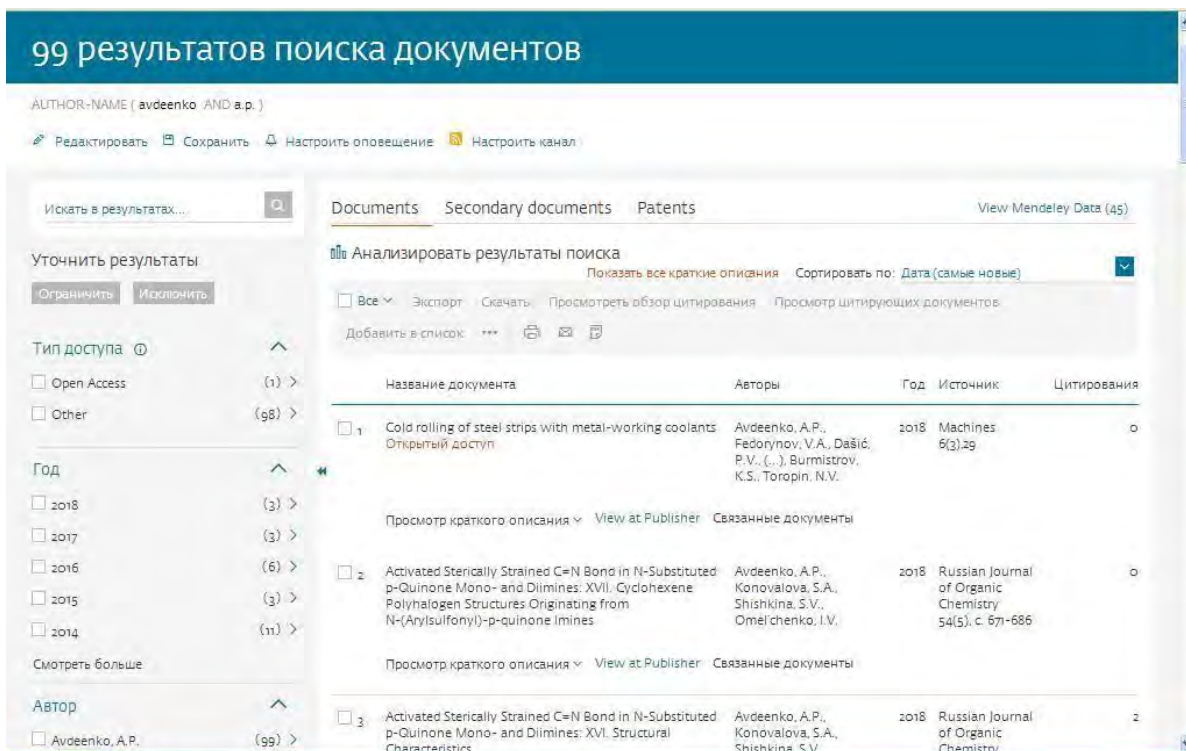


Рисунок 6.3 – Сторінка результатів пошуку документів бази даних Scopus

На вкладці **Documents** наведено перелік документів (статей), які відповідають умовам пошуку. Статті можна сортувати за роком видання, за автором, за кількістю цитувань, за назвою джерела (журналу). З кожним документом (статтею) можна ознайомитися окремо – для цього треба вибрати відповідну дію (див. рис. 6.3):

- переглянути дані про документ, які містяться у базі Scopus (за натисканням на назву статті);
- переглянути анотацію (**Просмотр краткого описания**);
- переглянути статтю на сайті видавника (**View at Publisher**);
- переглянути перелік статей, що мають однакові посилання (**Связанные документы**);
- переглянути перелік цитувань (за натисканням на кількість цитувань);
- переглянути відомості про кожного автора (за натисканням на прізвище автора) (рис. 6.4);
- переглянути відомості про джерело/журнал (за натисканням на назву джерела) (рис. 6.5).

Вкладка **Secondary documents** містить перелік вторинних документів. Це документи, які були отримані із довідкового списку документів Scopus, який недоступний безпосередньо в цієї базі, оскільки він не індексується базою Scopus. Вкладка **Patents** містить перелік патентів, які відповідають умовам пошуку.

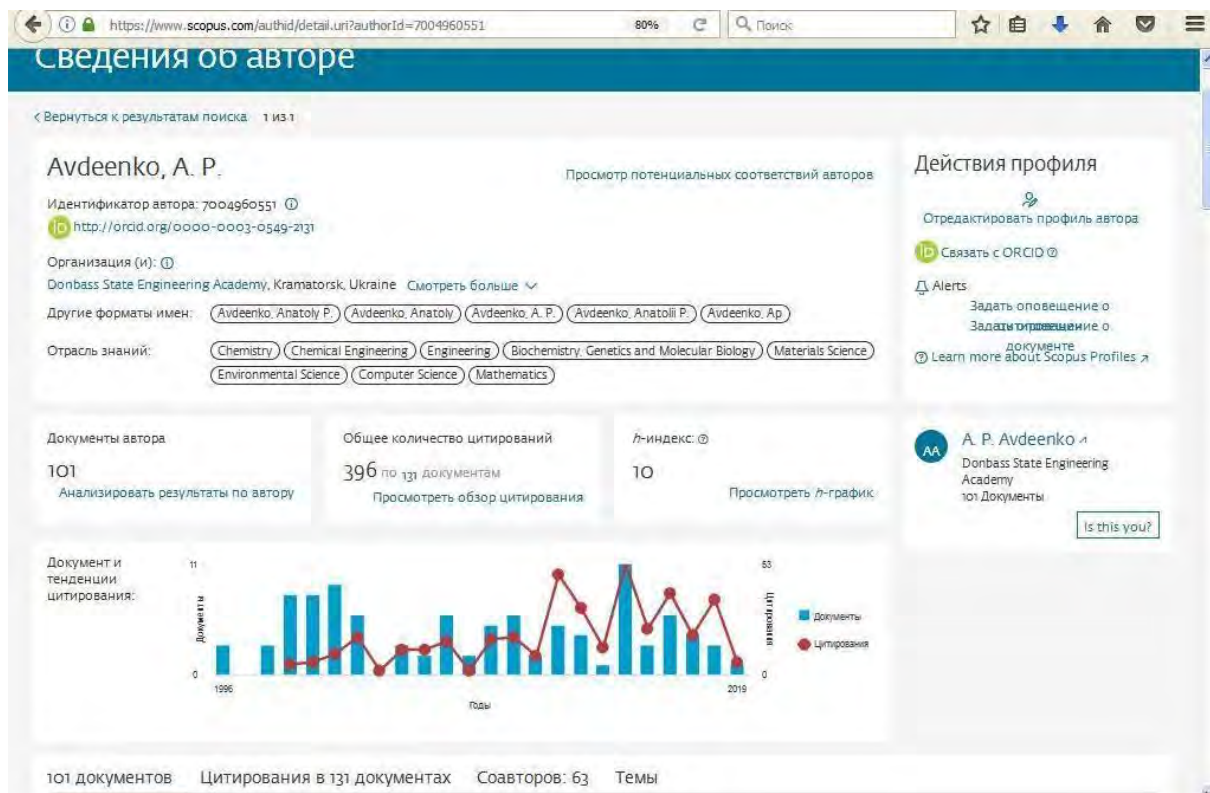


Рисунок 6.4 – Відомості про автора, що містяться у базі даних Scopus

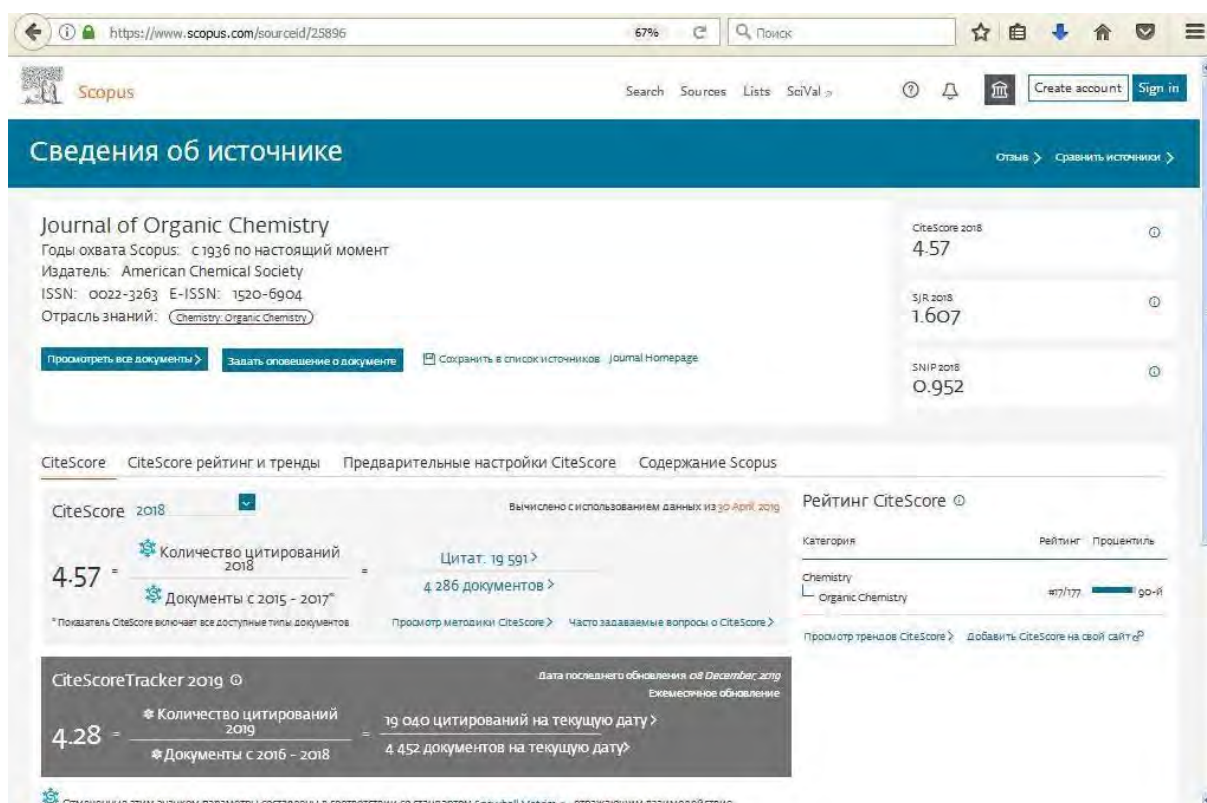


Рисунок 6.5 – Відомості про джерело (журнал), що містяться у базі даних Scopus

На сторінці результатів пошуку також є посилання *View Mendeley Data*, яке направляє до сторінці сайту *Mendeley*, яка містить перелік експериментальних даних, зокрема, даних рентгеноструктурного аналізу відповідного документу (статті) (рис. 6.6).

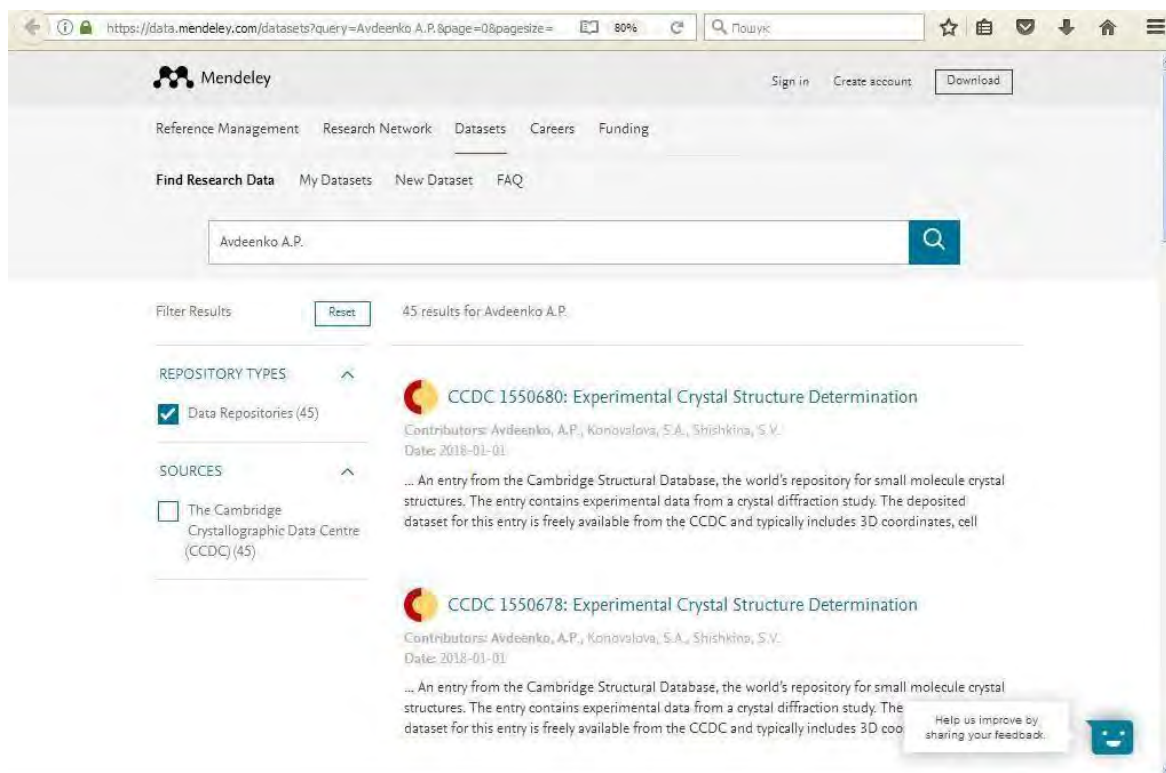


Рисунок 6.6 – Перелік даних рентгеноструктурного аналізу сайту Mendeley

При натисканні на назву відповідних даних сайт *Mendeley* перенаправляє на офіційний сайт джерела даних, зокрема, на сайт CCDC, який надає дані рентгеноструктурного аналізу (рис. 6.7).

При пошуку автора у Scopus необхідно перейдіть на вкладку *Поиск авторов*. Далі треба ввести прізвище автора, ініціали, організацію та/або ORCID. Для пошуку необхідно натиснути *Поиск* (рис. 6.8).

Пошук авторів допомагає знайти в Scopus документи, написані певною людиною, навіть якщо ім'я автора наведено інакше. Наприклад, в одному документі ім'я автора може бути записано як Smith, J, а в іншому – Smith, John. *Ідентифікатор учасника Scopus* забезпечує ідентифікацію при пошуку у разі різних найменуваннях автора.

Функція «Ідентифікатор авторів Scopus» допомагає розрізняти авторів з поширеними іменами, наприклад Smith або Lee, пропонуючи список можливих відповідних авторів із зазначенням їх організацій та галузей знань, в яких вони працювали.

Наприклад, якщо в результаті пошуку знайдені два учасника з ім'ям Ayre, G., можна переглянути їх організації або галузі знань, в яких вони працювали, щоб вибрати для пошуку правильного автора з ім'ям Ayre, G.

CCDC FIZ Karlsruhe CSD Entry: RIGQUW

Simple Search Structure Search Unit Cell Search Formula Search

Your query was: DOI: doi:10.5517/ccdc.csd.cci1p1y88si and the search returned 1 record.

Database Identifier	Deposition Number
<input checked="" type="checkbox"/> RIGQUW	1550630

Download

3D viewer

Chemical diagram

Additional details

Deposition Number	1550630
Date Citation	A. P. Avdeenko, S. A. Konovalova, S. V. Shishkina CCDC 1550630: Experimental Crystal Structure Determination, 2018, DOI: 10.5517/ccdc.csd.cci1p1y8
Deposited on	17/03/2017

Associated publications

A. P. Avdeenko, S. A. Konovalova, S. V. Shishkina, Zhurnal Organicheskoi Khimii, 2018, 54, 62, DOI: 10.1134/S1070423018010080

Рисунок 6.7 – Дані рентгеноструктурного аналізу

Scopus

Поиск авторов

Документы Авторы Организации Расширенный поиск

Фамилия автора: Avdeenko

Имя автора: A.P.

Поиск Q

ORCID

Рисунок 6.8 – Вікно пошуку авторів бази даних Scopus

Функція «Ідентифікатор учасника Scopus» також допомагає знаходити авторів, які по-різному цитувалися. Групуючи імена авторів під одним унікальним ідентифікаційним номером учасника, Scopus враховує різне написання прізвища автора, всі можливі поєднання імені та прізвища автора, а також написання прізвища автора з ініціалами і без ініціалів. У результаті в умови пошуку за конкретним автором включаються переважно ім'я автора і різні варіанти написання цього переважного імені. Наприклад, при пошуку по автору Ayre, G в результати включаються документи, ім'я автора яких написано як Ayre, Gareth і Ayre, G.

Також можна шукати автора за номером ORCID (Open Research and Contributor ID – відкритий ідентифікатор дослідників і учасників) (див. рис. 2.26), що значно спрощує процедуру пошуку. У результаті пошуку, крім загальних даних про автора (див. рис. 6.4), система Scopus надає повний перелік публікацій даного автора (рис. 6.9).

Название документа	Авторы	Год	Источник	Цитирования
Halogenation of N-substituted para-quinone monoimine and para-quinone monooxime esters: V. Chlorination and bromination of N-arylsulfonyl-1,4-benzoquinone monoimines dialkyl-substituted in the quinoid ring	Avdeenko, A.P., Konovalova, S.A.	2006	Russian Journal of Organic Chemistry 42(5), с. 669-682	18
Synthesis, X-Ray diffraction data, and ¹ H and ¹³ C NMR spectra of N-(N-Arylsulfonylimidoyl)-1,4-benzoquinonimines derived from N-Aroyl(acetyl)-1,4-benzoquinonimines	Avdeenko, A.P., Pirozhenko, V.V., Yagupolskii, L.M., Marchenko, I.L.	2001	Russian Journal of Organic Chemistry 37(7), с. 991-1000	17
Spontaneous resolution of new conglomerates in the series of 4-arenesulfonyliminocyclohex-2-en-1-ones	Kostyanovsky, R.G., Avdeenko, A.P., Konovalova, S.A., Kadorkina, G.K., Prosyani, A.V.	2000	Mendeleev Communications 10(1), с. 16-18	17
Activated Sterically Strained C=N Bond in N-Arylsulfonyl-p-quinone Mono and Diimines. III. Reaction with Hydrogen Azide	Avdeenko, A.P., Menafova, Yu.V., Zhukova, S.A.	1998	Russian Journal of Organic Chemistry 34(2), с. 210-220	15
...

Рисунок 6.9 – Перелік публікацій певного автора, що містяться у базі даних Scopus

Система Scopus надає також можливість знайти дані про певне видання. При цьому можна уточнювати критерії пошуку – вибрати відповідну галузь або науковий напрям, режим доступу і т. і. (рис. 6.10).

Патентна інформація стає все більш актуальною для хіміків-синтетиків, причому повнотекстові патенти, в цілому, значно доступніші за статті в академічних журналах.

Пошук патентів США доступний через веб-сайт **USPTO** за адресою: <https://www.uspto.gov/patents-application-process/search-patents>. Патенти у форматі HTML доступні з 1976 року. Починаючи з 1790 року, вони представлені у вигляді посторінково відсканованих документів (TIF файли).

Пошук патентів можливий також через пошукову систему **Google Patents** (<https://patents.google.com/>).

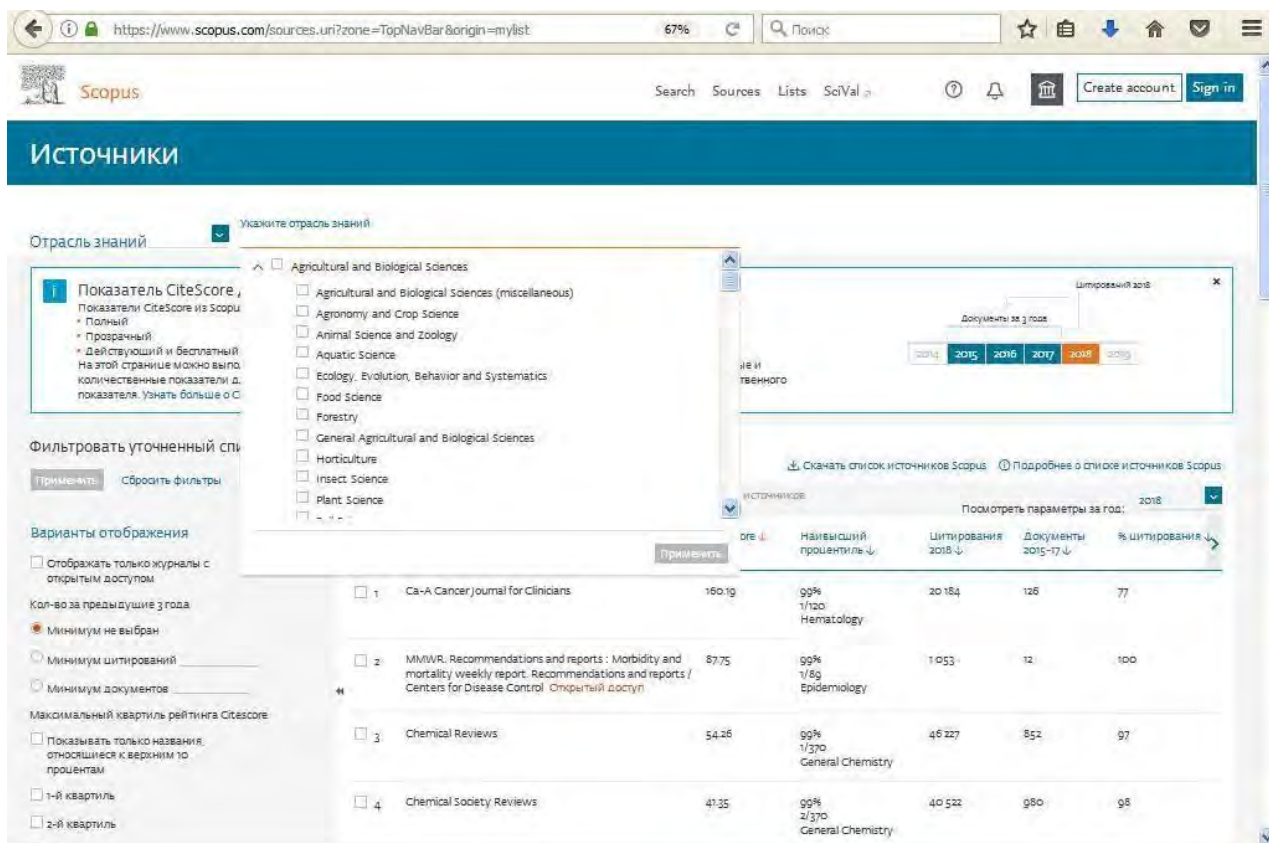


Рисунок 6.10 – Вікно пошуку видань (джерел) у базі даних Scopus

Номер патенту є «магічним» ключем до патентної пошукової інформаційної системи. Незалежно від того, в яку дату був виданий патент, якщо відомий номер патенту, можна швидко отримати повнотекстовий патент, використовуючи безкоштовні інструменти, доступні в Інтернеті. Практично всі веб-сайти для безкоштовного пошуку патентів дозволяють ввести номер патенту та отримати його PDF-версію.

Якщо відомий номер патенту, для пошуку можна використовувати як **Google Patents** так і веб-сайт **USPTO** – необхідно тільки ввести номер патенту без коми у пошукову строку. При використанні веб-сайту USPTO патент повинен бути довжиною сім номерів (якщо потрібно, додайте попередні нулі).

Якщо номер патенту невідомий, можна шукати патенти за темою чи винахідником, але варіанти залежать від того, наскільки старі патенти необхідні. Патенти, видані після 1975 року, можна легко шукати за ключовими словами, використовуючи ряд безкоштовних інструментів. Для патентів, виданих у 1975 році або раніше варіанти пошуку є складнішими. Багато ранніх патентів зараз можна шукати в повнотекстовому форматі за допомогою **Google Patents**, хоча цифрові тексти створюються автоматично і можуть містити помилки або бути важкими для пошуку.

Патенти США, видані з 1790 по 1975 роки, можна шукати на веб-сайті **USPTO** лише за датою випуску, номером патенту або класифікаційним кодом. Екран розширеного пошуку (<https://patents.google.com/advanced>) патентів Google дозволить здійснити пошук за номером патенту, винахідником, правонаступником, темою, номером класифікації та датою. Після пошуку можна уточнити результати за датою випуску, датою публікації, патентним відомством, статусом подачі та типом

патенту.

Більшість інших основних баз патентів також є безоплатними. Серед них:

– **EPO Espacenet** (<https://worldwide.espacenet.com/>), асоційований з Європейським патентним офісом;

– **WIPO IP Portal** (<https://patentscope.wipo.int/beta/ru/search.jsf>) – пошук по національним патентним фондам і фондам РСТ (Patent Cooperation Treaty);

– **GOV.UK** (<https://www.gov.uk/topic/intellectual-property/patents>) – база Британського патентного офісу;

– **CANZLER & BERGMEIER** (<https://www.cb-patent.com/en/ip-rights/patent/>) – база європейських патентів;

– **FPO** (<http://www.freepatentsonline.com/search.html>) – пошук патентів по національним патентним фондам (US Patents, US Patent Applications, EP documents, Abstracts of Japan, WIPO (PCT), German Patents);

– **Федеральний Інститут Промислової власності** (<https://www1.fips.ru/elektronnye-servisy/>) – широка база патентів, авторських свідоцтв та патентів колишнього СРСР (містить зручну пошукову систему і широку базу відкритих реєстрів);

– **Derwent World Patents Index (DWPI)** <https://clarivate.com/derwent/solutions/derwent-world-patent-index-dwpi/> – найповніша в світі добірка патентних документів з професійними анотаціями і коментарями, отриманих від 40 патентних бюро в усьому світі. Всі дані патентів регулярно оновлюються новою інформацією, включаючи дані, пов'язані з Ресурсом з хімії Derwent, унікальною базою даних структурних формул;

– **УКРПАТЕНТ** (<https://ukrpatent.org/uk>) – державне підприємство "Український інститут інтелектуальної власності" (Укрпатент) – інституційна складова державної системи правової охорони інтелектуальної власності в Україні; пошук патентів на винаходи і патентів на корисні моделі краще здійснювати на сторінці <https://ukrpatent.org/uk/articles/bases2> за посиланням *Спеціалізована БД "Винаходи (корисні моделі) в Україні"*.

У всіх патентних базах можливий пошук як за номером патенту, так і за ключовими словами або назвою патенту.

Порядок виконання роботи

Для виконання завдань цієї роботи необхідний доступ до мережі Інтернет. Результати роботи треба оформити у вигляді текстового документу. На першій сторінці звіту треба навести назву лабораторної роботи, вказати групу, прізвище і ініціали студента.

Результати пошуку кожного завдання треба наводити з нової сторінки з вказівкою назви завдання.

Результати роботи необхідно зберегти у файлі з назвою Прізвище_Рік_Laba_6 у форматі *.docx (наприклад, **Ivanov_2021_Laba_6.docx**).

Завдання 1. Пошук даних науковця у наукометричній базі Scopus.

Відкрити у браузері пошукову сторінку наукометричної бази Scopus (<https://www.elsevier.com/solutions/scopus>).

Знайти профіль автора-науковця (прізвище автора-науковця вказує студент) і визначити його основні наукометричні показники:

– прізвище, ім'я науковця;

- Scopus Author ID науковця;
- номер ORCID (за наявності);
- кількість публікацій;
- кількість цитувань;
- індекс Хірша;
- установа, де працює науковець, і де він працював раніше;
- назва і джерело останньої публікації і її доступність;
- навести DOI статті.

Для того, щоб переглянути, де науковець працював раніше, необхідно у профілі автора у вкладці *Author details* натиснути на вкладку *Author history*. Поряд з переліком видань, у яких публікувався автор (*Source name*), знаходиться стовпець *Related affiliation*, в якому розташована необхідна інформація.

При негативному результаті вказати "не знайдено" і провести пошук для іншого автора-науковця (за узгодженням з викладачем).

У звіті навести знайдені дані в текстовому форматі і навести скріншот профілю автора-науковця (рис. 6.11).

Завдання 2. Пошук у наукометричній базі Scopus видань (джерел), які публікують результати наукових досліджень за певним науковим напрямом.

Відкрити у браузері пошукову сторінку **наукометричної бази Scopus** (<https://www.elsevier.com/solutions/scopus>).

Знайти перелік видань (джерел), які публікують результати наукових досліджень за певним науковим напрямом (вказує студент). Визначити наявність серед них видань України. Визначити, які з видань надають вільний доступ до публікацій. Визначити видання з найбільш високим рейтингом. У звіті навести знайдені дані в текстовому форматі.

Завдання 3. Пошук патентної інформації.

Знайти патент за номером (вказує викладач). У звіті вказати:

- номер патенту;
- назву патенту;
- авторів патенту;
- утримувача патенту;
- реферат патенту;
- скріншот з даними патенту.

Прізвище, ім'я науковця: Avdeenko, A. P.

Scopus Author ID науковця: 7004960551.

Номер ORCID: 0000-0003-0549-2131.

Кількість публікацій: 103.

Кількість цитувань: 400.

Індекс Хірша: 10.

Установа, де працює науковець: Donbass State Engineering Academy, Kramatorsk, Ukraine.

Остання публікація: Kuz'menko, L., Avdeenko, A., Konovalova, S., Vasylyuk, S., Fedorova, O., Monka, N., Krychkovska, A., Lubenets, V. Synthesis and study of pesticidal activity of some N-arylthio-1,4-benzoquinone imines. *Biointerface Research in Applied Chemistry*. 2019, Vol. 9, No. 5, P. 4232–4238. DOI [10.33263/BRIAC95.232238](https://doi.org/10.33263/BRIAC95.232238) (Текст публікації доступний).

Скріншот сторінці профілю науковця Avdeenko, A. P.:

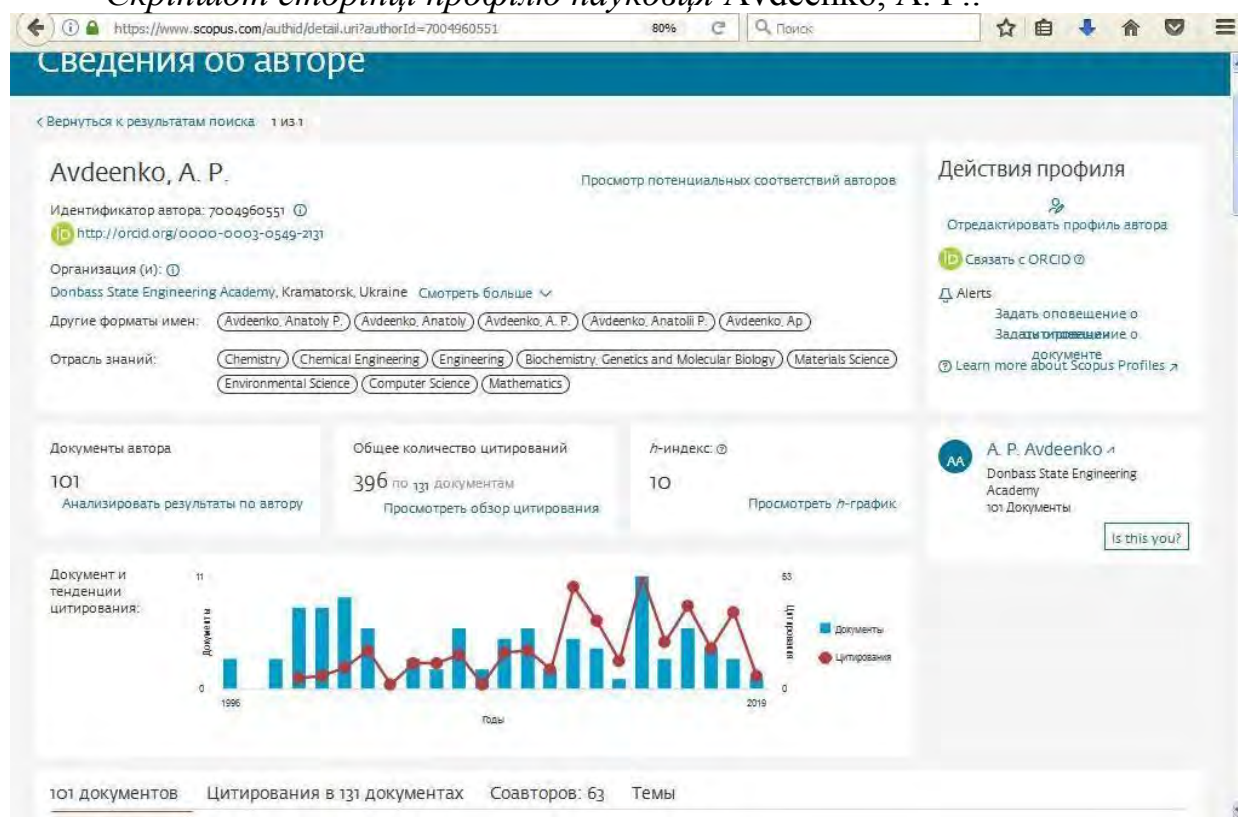


Рисунок 6.11 – Приклад оформлення звіту завдання 1.

Контрольні питання

1. Що таке ID науковця?
2. Що таке ResearcherID?
3. Що таке ORCID?
4. Як знайти номер ORCID науковця?
5. Що таке Scopus Author ID?
6. Як знайти номер Scopus Author ID науковця?
7. Що таке Індекс Хірша?
8. Як розраховується Індекс Хірша?
9. Що таке DOI?
10. Наведіть основні бази даних, в яких можна вести пошук патентної інформації.

Лабораторна робота № 6. Комплексний пошук інформації з хімії у мережі Internet.

Мета роботи: оволодіти основними прийомами комплексного пошуку хімічної інформації за заданою темою в електронних ресурсах.

Питання для самоконтролю

1. Шляхи оптимізації пошуку інформації з хімії у мережі Internet.
2. Типи запитів при пошуку бібліографічної інформації.
3. Алгоритм пошуку наукових публікацій.
4. Алгоритм пошуку даних науковця.
5. Поняття ORCID номеру.
6. Поняття ResearcherID.
7. Поняття Scopus Author ID.
8. Поняття DOI статті.

Короткі теоретичні відомості

Кількість інформації на планеті подвоюється кожні 1,5 – 2 роки. Кожні 2,5 – 3 роки подвоюється число заявок на наукові відкриття та винаходи. Таке експоненціальне зростання інформації призводить до того, що людині, вченому, який працює навіть у вузькій області, стає все важче відстежувати результати своїх колег, а значить зростають нераціональні витрати часу і коштів на «відкриття велосипеда», повторення того, що вже зроблено іншими, опубліковано, запатентовано.

Для того, щоб швидше й ефективніше отримати потрібну інформацію, в Інтернеті існують *шляхи оптимізації пошуку*. Насамперед необхідно максимально коректно задавати умови пошуку для мінімізації кількості отриманих посилань (часто їх сотні тисяч і мільйони).

Одним із найпростіших методів є пошук фрази (як правило, її треба взяти в лапки) замість набору ключових слів. Так, на запит *quinoneimine synthesis* пошукова система Google видає понад 90 000 посилань, тоді як на запит у форматі «*quinoneimine synthesis*» – лише 3.

Інший шлях – *використання логічних операторів*. У найпростішому випадку включення чи виключення специфічного терміна із запиту досягається додаванням префікса + чи - перед терміном. Наприклад, запит *drugs+antiinflammatory -aspirin* запустить пошук протизапальних препаратів, що відмінні від аспірину.

Більш гнучкі методи пошуку використовують інтуїтивно зрозумілі логічні оператори **AND**, **OR**, **NOT** (деякі пошукові системи дають змогу використовувати й інші оператори). Ці оператори в комбінації з дужками дозволяють задавати достатньо складні умови пошуку. Правила організації запиту можуть відрізнятися у різних пошукових системах, тому в кожному конкретному випадку варто ознайомитись із ними перед тим, як почати застосовувати складні варіанти пошуку.

Пошукові системи часто надають можливість обмежити пошук певними додатковими параметрами. Наприклад, пошук тільки в заголовках веб-сторінок, пошук документів заданого формату (наприклад, лише PDF файлів) і навіть обмеження доменів, у яких проводиться пошук. Щоб уникнути нераціонального витрачання часу на пошук спеціалізованої інформації, варто починати його на добре

відомих порталах, наприклад, присвячених хіміко- біологічним наукам.

Спеціалізовані системи надають можливість крок за кроком знаходити потрібну спеціальну інформацію, проте відносно загальну інформацію, а, іноді, і спеціальні дані, можна знайти за допомогою загальних пошукових систем.

Безумовно, якість і повнота пошуку інформації залежить від повноти охоплення веб-ресурсів і технології пошуку, закладеної в системі. Дуже важливою є коректна побудова пошукового запиту користувачем, що вимагає певної практики.

Слід зазначити, що пошукові системи загального спрямування, наприклад, усім відомі системи Google, Yahoo, часто можуть бути корисними і для хіміків професіоналів. Тому з метою оптимізації витрат часу, пошук слід починати з пошукових систем загального спрямування, зокрема, Google.

При **пошуку конкретної наукової публікації** (при наявності вихідних даних) типи запитів можна розмістити у наступному порядку (за результативністю):

- DOI статті;
- повна назва статті мовою оригіналу;
- повна назва статті англійською мовою;
- повна або скорочена назва видання (журналу) (в цьому випадку система направить на сторінку даного видання, де треба буде знайти конкретний номер журналу за вихідними даними – зазвичай це можна зробити через архів номерів).

Якщо пошук не дав результату (особливо це стосується видань не англійською мовою), то на наступному етапі можна використовувати вже спеціалізовані пошукові системи. Найбільш повними і зручними у використанні являються:

Electronic Journals Library (Elektronische Zeitschriftenbibliothek EZB) (<http://ezb.uni-regensburg.de/?lang=en>) – електронна бібліотека журналів при бібліотеці університету Регенсбурга, надає посилання на майже 60 тис. безкоштовних журналів з різних галузей науки, техніки;

UCSF Library (University of California San Francisco) (<https://www.library.ucsf.edu/journals/>) – пошукова сторінка наукової бібліотеки університету Сан-Франциско, яка містить в своїй базі посилання на видання з різних напрямів, зокрема, 2556 онлайн-журналів з хімії;

Якщо пошук не дав результату і на цьому етапі, то вже треба використовувати спеціалізовані національні пошукові системи або на спеціалізовані ресурси відповідного напрямку.

При **пошуку наукових публікацій за певним напрямом** досліджень або за певними ключовими словами пошук також можна розпочати з пошукових систем загального спрямування, зокрема, Google, або Google Scholar, так як вони надають результати пошуку серед широкого кола джерел. На наступному етапі вже можна переходити до спеціалізованих тематичних баз даних і пошукових систем, докладно розглянутих у підрозділах 2.1.1, 2.1.2, 2.2.1–2.2.4 конспекту лекцій [1].

Пошук **наукометричних даних певного науковця** краще одразу починати зі спеціалізованих систем ідентифікації науковців (див. підрозділ 2.2.4 конспекту лекцій [1]).

Якщо відомий хоча б один із ідентифікаторів (ORCID номер, ResearchID, Scopus Author ID), то пошук треба вести на відповідному ресурсі. Слід зазначити, що сторінка науковця у системі ORCID може містити всі його ідентифікатори, але це залежить від того, чи встановив сам науковець зв'язки між системами ORCID,

Pablon і Scopus при реєстрації в системі ORCID.

Якщо ідентифікатори науковця невідомі, то пошук даних можна розпочати з системи ORCID, але слід враховувати, що прізвище науковця в цій системі може бути наведено будь-якою мовою, так як це залежить від самого науковця, який самостійно при реєстрації обирає мову написання прізвища і імені.

Пошук даних за прізвищем науковця можна також вести і в системах Scopus і Pablon, але в цих системах слід враховувати різні можливі варіанти написання прізвища та імені англійською мовою.

Якщо пошук не дав результату, то на наступному етапі можна шукати необхідні дані через пошукові системи загального спрямування, зокрема, Google або Google Scholar. Можна також спробувати знайти дані про певного науковця за його місцем роботи. Зараз зазвичай всі наукові і академічні установи розміщують на сторінках сайту своєї організації наукометричні дані або особисті сторінки співробітників-науковців.

Порядок виконання роботи

Для виконання завдань цієї роботи необхідний доступ до мережі Інтернет. Результати роботи треба оформити у вигляді текстового документу. На першій сторінці звіту треба навести назву лабораторної роботи, вказати групу, прізвище і ініціали студента.

Результати роботи необхідно зберегти у файлі з назвою Прізвище_Рік_Laba_7 у форматі *.docx (наприклад, **Ivanov_2021_Laba_7.docx**).

Завдання 1. Здійснити пошук необхідної інформації у мережі Інтернет за певною темою (вказує студент).

У файлі звіту навести наступну інформацію:

- ключові слова або ключова фраза;
- бібліографічна інформація (кількість публікацій за даною темою, на- вести деякі публікації з короткими рефератами);
- вказати статті, для яких можливо отримання повного тексту;
- навести патенти за даною темою (за наявності);
- знайти авторів, які найбільш часто публікують статті за даною темою.

Контрольні питання

9. Наведіть шляхи оптимізації пошуку інформації з хімії у мережі Internet.
10. Наведіть типи запитів при пошуку бібліографічної інформації.
11. Наведіть алгоритм пошуку наукових публікацій.
12. Наведіть алгоритм пошуку даних науковця.
13. Що таке ORCID номер?
14. Що таке ResearcherID?
15. Що таке Scopus Author ID?
16. Що таке DOI статті?

ЛІТЕРАТУРА

1. Комп'ютерні та інформаційні технології в хімії: стислий конспект лекцій для студентів спеціальності 102 «Хімія» денної форми навчання / уклад. С. О. Коновалова. – Краматорськ : ДДМА, 2019. – 80 с.
2. ACD/ChemSketch. Version 2012 for Microsoft Windows. Drawing Chemical Structures and Graphical Images Tutorial. / Advanced Chemistry Development, Inc. 2013. – 156 p.
3. Bienz S. Short Manual to the Chemical Drawing Program ChemDraw / S. Bienz. University of Zurich. 2013. – 22 p.
4. MarvinSketch User's Guide. Available at: <https://docs.chemaxon.com/display/docs/MarvinSketch+User%27s+Guide>
5. Ракша О. В. Інформаційні технології у фізичній хімії: навчально- методичний посібник / О. В. Ракша. – Донецьк: ДонНУ, 2013. – 98 с.
6. Конспект лекцій (опорний) з дисципліни “Комп'ютерна хімія” / уклад.: М. Л. Кулігін. – Херсон: ХНТУ, 2013 – 80 с.
7. Винник О.Ф. Застосування програмного засобу ACD/ChemSketch (Freeware) 12.0 для написання хімічних формул та моделювання хімічних процесів. Навчальний посібник. / О.Ф. Винник, О.М. Свєчнікова, Т.Я. Грановська. – Харків, 2018. – 92с.
8. Фокін А. Г., Васильєва Л. В., Первухін В. М. Методичні вказівки до лабораторних робіт з дисципліни "Інформатика". "Основи роботи в мережі Internet".- Краматорськ : ДДМА, 2007. - 48 с.
9. Гужва В. М. Інформаційні системи і технології на підприємствах : навч. посібник.- К: КНЕУ, 2001. - 400 с.
10. Інформатика. Комп'ютерна техніка. Комп'ютерні технології : підручник / за ред. О. Пушкаря. - К: Академія, 2003. - 704 с.
11. Bienz S. Short Manual to the Chemical Drawing Program ChemDraw. University of Zurich, 2013. 22 p.
12. CS ChemDraw 17.0 for Windows and Macintosh User's Guide. CambridgeSoft Corporation, 2017. 378 p.
13. Origin User Guide. OriginLab Corporation, 2017. 286 p.
14. Kenny B. Lipkowitz, Thomas R. Cundari, Valerie J. Gillet Reviews in Computational Chemistry. Volume 6. Wiley-VCH, 2001. 480 p.
15. Білий О.В., Біла Н.І. Створення та редагування хімічної графіки в програмі ChemDraw. Учбово-методичний посібник. Донецьк: ДонНУ, 2003. 45 с.
16. Бондар О.С. Практикум з комп'ютерної хімії. Навчальний посібник / О.С. Бондар. Чернігів: ЧНПУ, 2017. 68 с.
17. Практичний курс комп'ютерної структурної хімії. Навчальний посібник / М.А. Туровський, О. М. Туровська. Донецьк: ДонНУ, 2004. 131 с.
18. Куленко О.А. Особливості ознайомлення студентів-хіміків з основними видами ліцензій на програмні ресурси під час навчальних занять з інформаційних технологій в хімії / О.А. Куленко // Хімія, біотехнологія, екологія та освіта : зб. матер. VII Міжнар. наук.-практ. інтернет-конф., м. Полтава, 17 – 18 травня 2023 р. : – Полтава, 2023. – С. 244 – 251.

ІНФОРМАЦІЙНІ РЕСУРСИ

19. <http://www.cambridgesoft.com/> – пакет програмного забезпечення ChemOffice,

зокрема, графічний редактор хімічних формул ChemDraw.

20. <http://www.acdlabs.com> – ACD/ChemSketch Freeware for personal or academic use, пакет програмного забезпечення для малювання хімічних структур.

21. <http://www.chemaxon.com> – MarvinSketch, редактор хімічних формул.

22. <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov> – PubChem, відкрита база даних хімії Національного інституту охорони здоров'я (NIH).

23. <http://www.chemspider.com> – ChemSpider, безкоштовна база даних хімічних структур.

24. <http://www.orgsyn.org/> – Organic Syntheses, база методик синтезу.

25. <https://www.emolecules.com/> – e-Molecules, онлайнний ресурс пошуку інформації у власній базі даних ресурсу та провідних хімічних каталогах і базах даних властивостей хімічних сполук.

26. <http://www.commonchemistry.org/> – база даних COMMON CHEMISTRY.

27. <http://nfv.ukrintei.ua/> – Реєстр наукових фахових видань України.

28. <https://scholar.google.com/> – Google Scholar

29. <https://elibrary.ru/defaultx.asp> – eLIBRARY, наукова електронна бібліотека.

30. <https://www.elsevier.com/solutions/scopus> – Scopus, одна з найбільших уніфікованих реферативних баз даних рецензованої науково-дослідної літератури.

31. <https://clarivate.com/webofsciencegroup/solutions/web-of-science/> – Web of Science, база даних Інституту наукової інформації.