

Киреева Е.Д.

*Научный руководитель: ст.преподаватель Е.В. Шарпова
Муромский институт (филиал) федерального государственного образовательного
учреждения высшего образования «Владимирский государственный университет
имени Александра Григорьевича и Николая Григорьевича Столетовых»
602264, г. Муром, Владимирская обл., ул. Орловская, 23
E-mail:kireeva.ekaterina.08@mail.ru*

Использование ChemSpider для проведения химических исследований

Зарождение химии как науки произошло на рубеже XVII – XVIII веков. И уже в то время поток информации был велик, что возникла острая необходимость создания вспомогательных изданий, облегчающих исследователям ознакомление с тем, что сделано в науке ранее. Химия приобрела огромное значение в жизни современного человека. Наука стала настолько колоссальной, что давно уже невозможно удержать в памяти содержание даже узкой её области. Поток информации в современном мире огромен, многие правила работы с литературой теперь уже потеряли свой смысл. Рост числа научных документов практически исключает возможность ознакомления с ними путем непосредственного чтения или хотя бы просмотра всех документов. Информационный поиск приходится проводить, используя поисковые образы документов, отражающие их содержание хотя бы в краткой форме. Необходимо отметить, что работа с химической информацией осложнена ее спецификой – кроме естественного языка в химии применяются специальные языки брутто- и структурных формул. С появлением глобальной сети Интернет произошла автоматизация процедуры поиска, были созданы информационно-поисковые системы, электронные базы данных. Поиск химической информации и ее систематизация все еще является актуальной проблемой в современном мире, так как у большинства сайтов, которые находятся в свободном доступе, отсутствует гарантия надежности, и сообщаемые данные указаны не в полном объеме. Для того чтобы найденная информация была достоверной, необходимо обращаться к профессиональным поисковым источникам таким, как электронная база данных ChemSpider.

ChemSpider - это бесплатная база данных химических структур, обеспечивающая быстрый текстовый и структурный поиск доступа более чем к 100 миллионам структур из сотен источников данных.

Основная часть сайта предоставляет следующие возможности:

- Поиск информации по химическим названиям (систематическое название, синонимы, торговые наименования и т.д.);
- Поиск информации по химической структуре.
- Поиск важных данных (литературные ссылки, физические свойства, интерактивные спектры, поставщики химических веществ)

Поиск информации по химической структуре может выполняться несколькими способами:

- Создание запросов на основе структуры;
- Изображение структуры на веб – странице;
- Использование структурных файлов с Вашего компьютера.

Подробно проанализируем возможность поиска информации по химической структуре с использованием изображения структуры на веб – странице.

Необходимо произвести поиск информации по веществу 1,4-нафтохинон.

Рисуем структуру этого вещества в окне для рисования (см.рис.1).

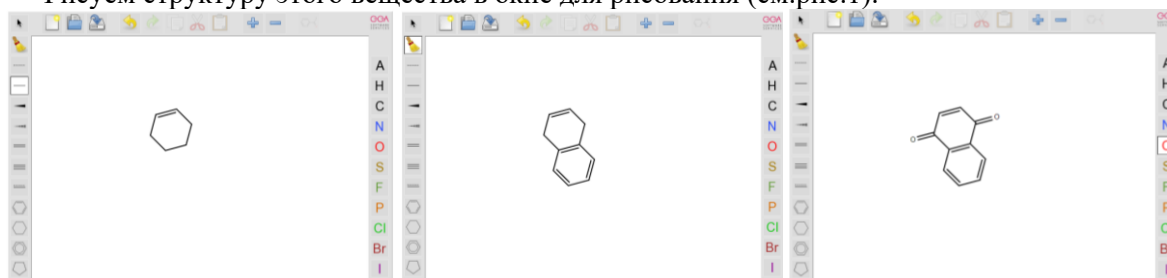


Рис.1. Построение структуры вещества 1,4-нафтохинон в ChemSpider.

Затем выбираем параметры поиска (точность совпадения, сходство, лимит поисковых запросов и т.д.) и производим поиск (см.рис.2). Следует уточнить, что сайт предоставляет преимущественно информацию на английском языке, но есть возможность осуществить перевод информации на выбранный язык.

Search options

Точный | Субструктура | Сходство

Точное Совпадение

Все Таутомеры

Тот Же Скелет (Включая Н)

Тот Же Скелет (Исключая Н)

Все Изомеры

ФИЛЬТР ▾

Лимит Поисковых Запросов: 100

ЧЕТКОЙ ФОРМЫ

ПОИСК

Рис.2. Параметры поиска и поиск информации о структуре.

Сайт предоставляет информацию (свойства, поставщики, статьи и т.д.) о веществе 1,4-нафтохинон (см.рис.3).

Главная | О нас | Веб-API | Справка | Вход

ChemSpider

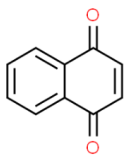
поиск и обмен химией

Для получения медицинской информации, касающейся Covid-19, пожалуйста, обратитесь во [Всемирную организацию здравоохранения](#) или местное медицинское учреждение.

Простой | Структура | Дополнительно | История

Найдено 1 результат

Поисковый запрос: Structure Search - точный



1,4-Нафтохинон

Молекулярная формула: C₁₀H₆O₂

Средняя масса: 158,153 да

Моноизотопная масса: 158,036774 да

ChemSpider ID: 8215

Этот источник рекомендуется

Рекомендуемый источник данных

The Merck Index Online has more data on this compound

антибактериальный препарат | фунгицид

Имена | **Свойства** | Поиски | Спектры | Поставщики | Статьи | Еще ▾

Рис.3. Информация о веществе 1,4-нафтохинон.

Таким образом, электронная база данных сайта ChemSpider позволяет исследователям получить наиболее полное представление о свободно доступных химических данных из одного онлайн-поиска. ChemSpider опирается на собранные источники, добавляя дополнительные свойства, связанную информацию и ссылки на исходные источники данных. Сайт предлагает поиск текста и структуры для поиска интересующих соединений и предоставляет уникальные услуги по улучшению этих данных путем курации и аннотации, а также интеграции их с приложениями пользователей.