

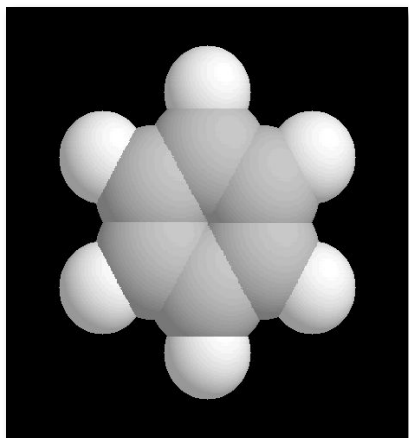
ІНФОРМАТИКА ТА ІНФОРМАЦІЙНІ ТЕХНОЛОГІЇ



МОДУЛЬ II ХІМІЧНА ІНФОРМАТИКА

Представлення хімічної структури: бензол

Бензол



ID #:

MUSE00000002

CAS #: 71-43-2

Інші назви:

Бензен

циклогекса-1,3,5-трієн

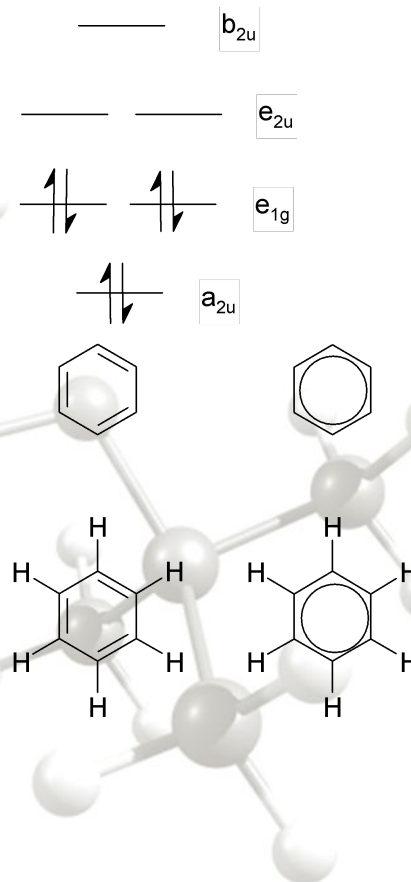
Таблиця зв'язків:

```
Benzene
-ISIS- 08200115272D

6 6 0 0 0 0 0 0 0 0999 V2000
-1.0306 -1.4375 0.0000 C 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
  0
-1.0318 -2.2648 0.0000 C 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
  0
-0.3169 -2.6777 0.0000 C 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
  0
 0.3995 -2.2644 0.0000 C 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
  0
 0.3966 -1.4338 0.0000 C 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
  0
-0.3187 -1.0247 0.0000 C 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
  0
 1 2 2 0 0 0 0
 3 4 2 0 0 0 0
 4 5 1 0 0 0 0
 2 3 1 0 0 0 0
 5 6 2 0 0 0 0
 6 1 1 0 0 0 0
M END
```

Лінійна нотація

- Wiswesser:RH
- MDL LN: C-C=C-C=C-C=@1
- SMILES: c1ccccc1
- InChI InChI=1/C6H6/c1-2-4-6-5-3-1/h1-6H



Рівні представлення хімічної інформації

1D

Назва, формула, лінійні коди (нотації), чисельне представлення фізико-хімічних даних

2D

Графічне пласке зображення хімічної структури сполуки, представлення у вигляді двумірних матриць

3D

Визначення Декартових координат усіх атомів хімічної частинки

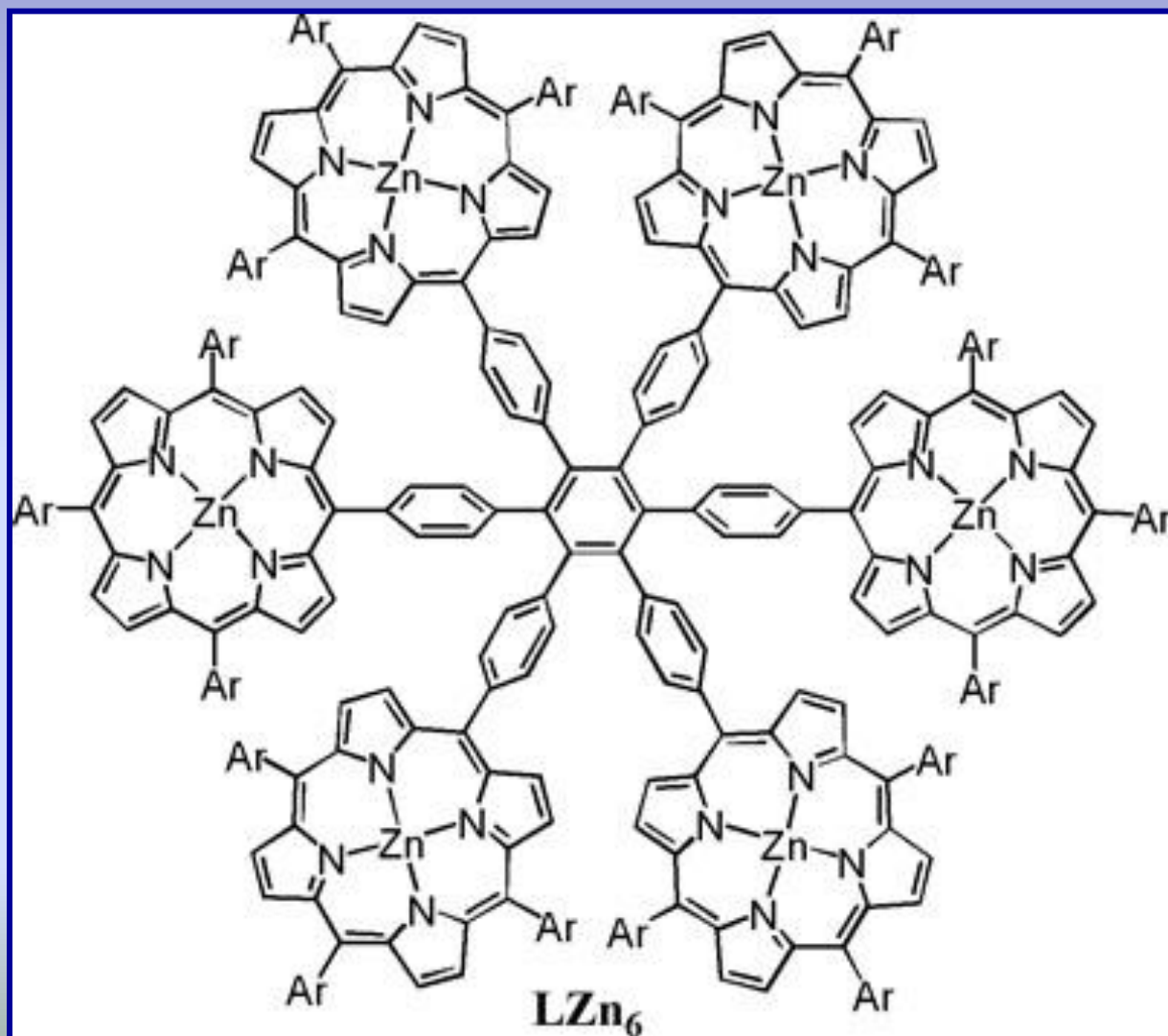
4D

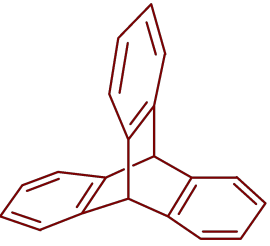
Інформація про поверхні сольватації, електростатичного потенціалу

5D

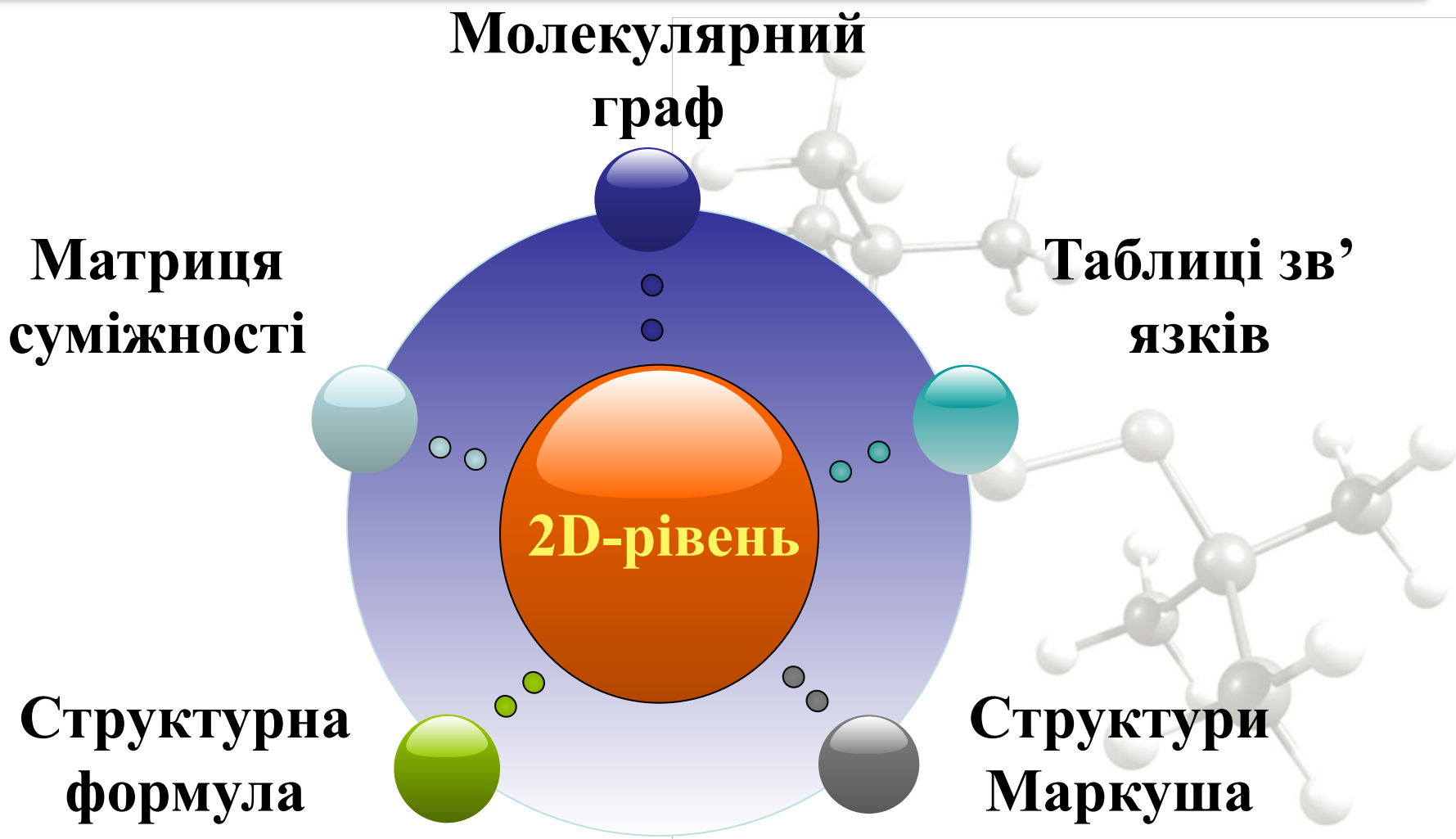
Інформація на рівні хімічних реакцій

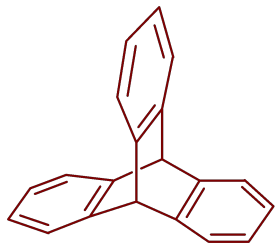
2D-РІВЕНЬ ПРЕДСТАВЛЕННЯ ХІМІЧНОЇ ІНФОРМАЦІЇ



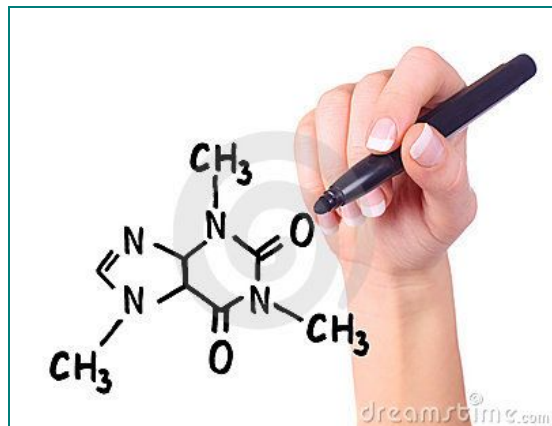


Способи представлення структурної інформації 2D-рівня





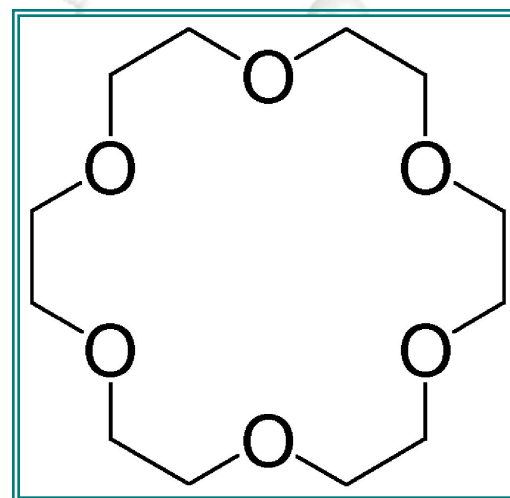
Структурна формула

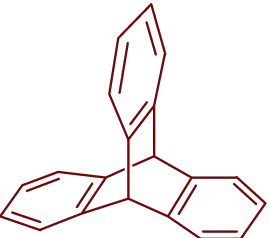


**Матриця
суміжності
1.7 кБ**

**Таблиця зв'язків
0.8 кБ**

**Рисунок Tif
10.7 кБ**



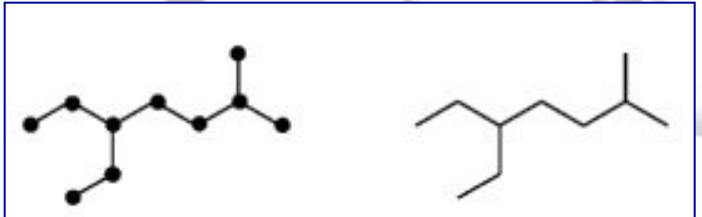
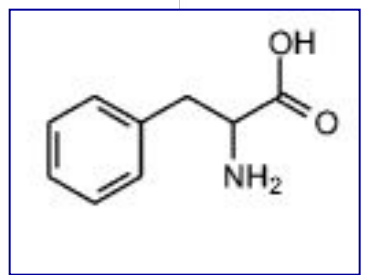
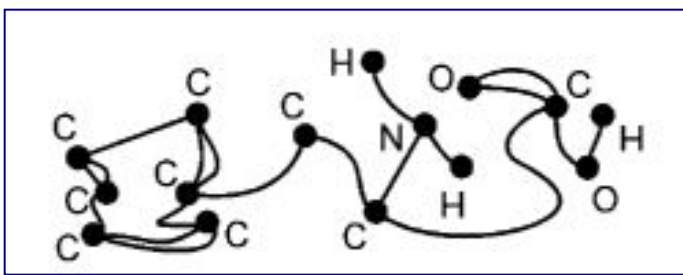
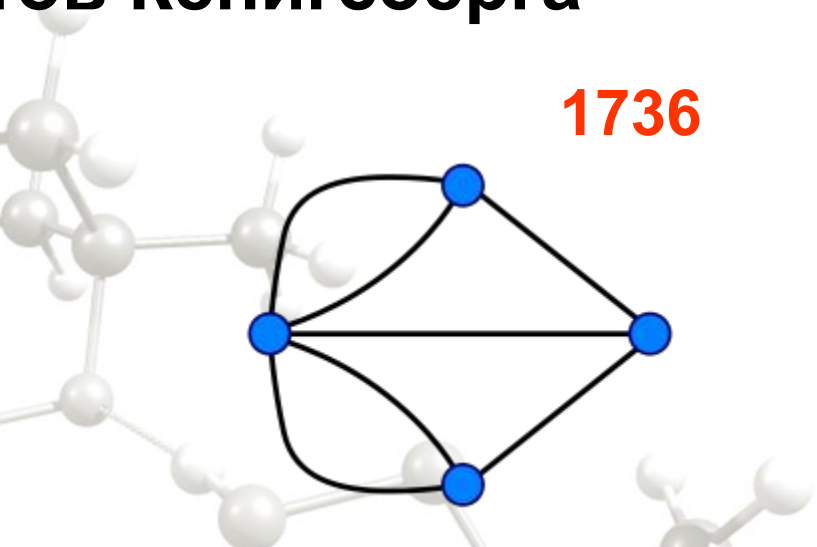


Використання теорії графів

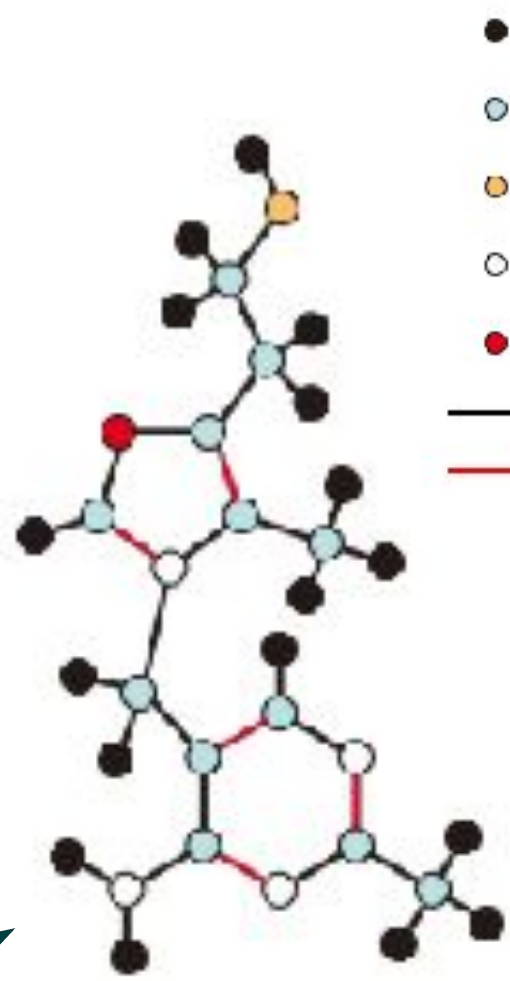
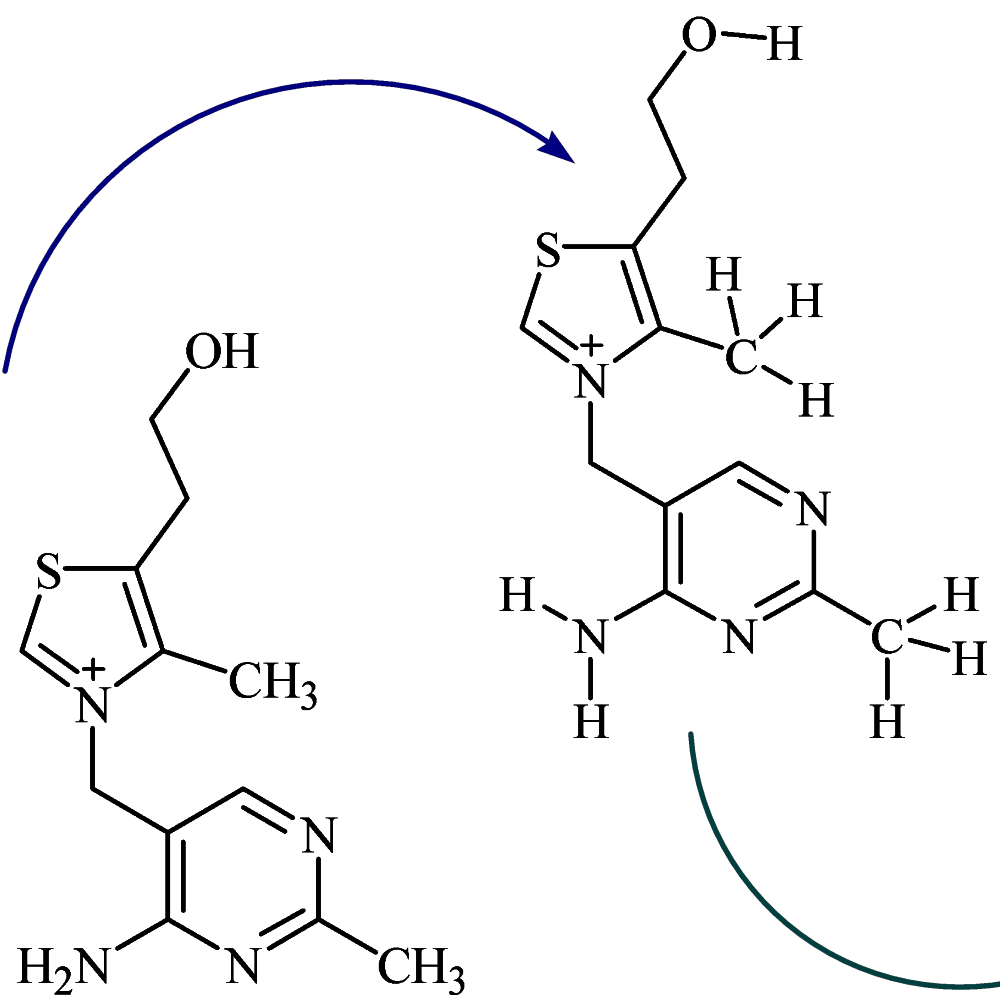
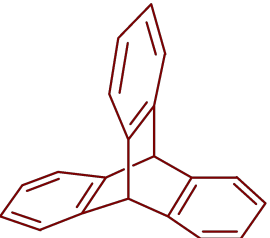
Проблема семи мостов Кёнигсберга



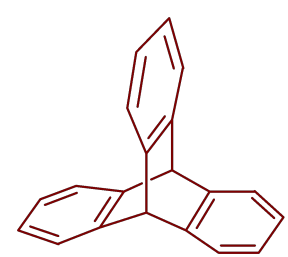
1736



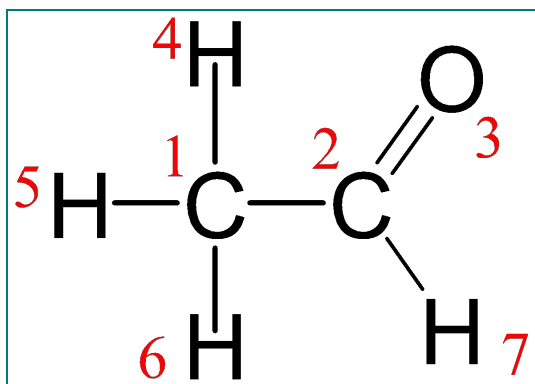
Використання теорії графів



- Hydrogen
- Carbon
- Oxygen
- Nitrogen
- Sulfur
- single bond
- double bond

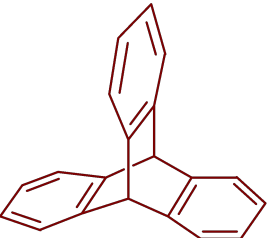


Матриця суміжності

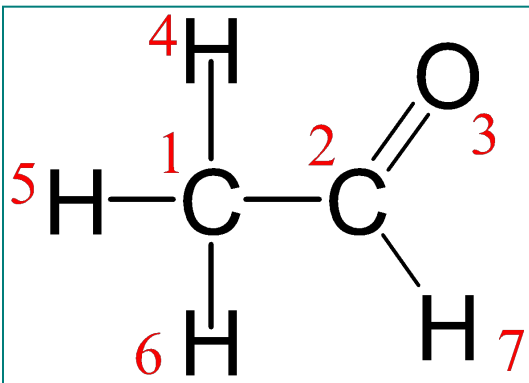


	1	2	3	4	5	6	7
1	0	1	0	1	1	1	0
2	1	0	1	0	0	0	1
3	0	1	0	0	0	0	0
4	1	0	0	0	0	0	0
5	1	0	0	0	0	0	0
6	1	0	0	0	0	0	0
7	0	1	0	0	0	0	0

$a_{ij} = 1$, если между атомами i и j имеется химическая связь,
 $a_{ij} = 0$, если между атомами i и j нет химической связи.



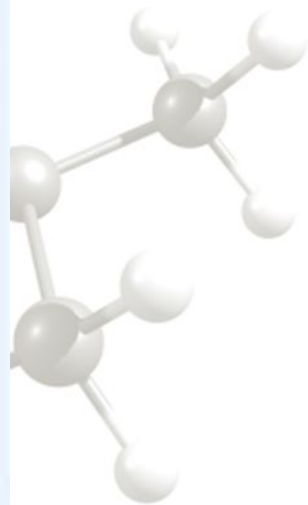
Матриця суміжності: етапи спрощення



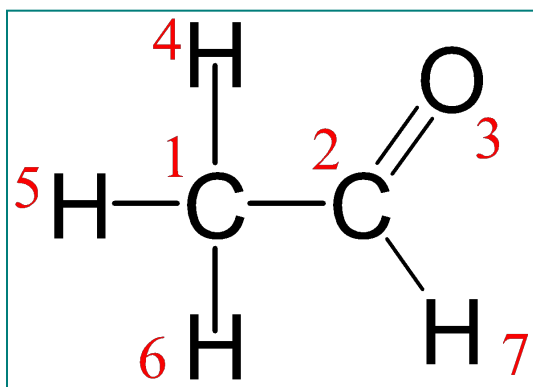
- Вилучення нулів
- Вилучення дублів
- Вилучення інформації про атоми Н

	1	2	3	4	5	6	7	
1	1	0	1	0	1	1	1	0
2	1	0	1	0	0	0	0	1
3	0	1	0	0	0	0	0	0
4	1	0	0	0	0	0	0	0
5	1	0	0	0	0	0	0	0
6	1	0	0	0	0	0	0	0
7	0	1	0	0	0	0	0	0

	1	2	3	4	5	6	7
1	1	1		1	1	1	
2	1		1				1
3		1					
4	1						
5	1						
6	1						
7		1					



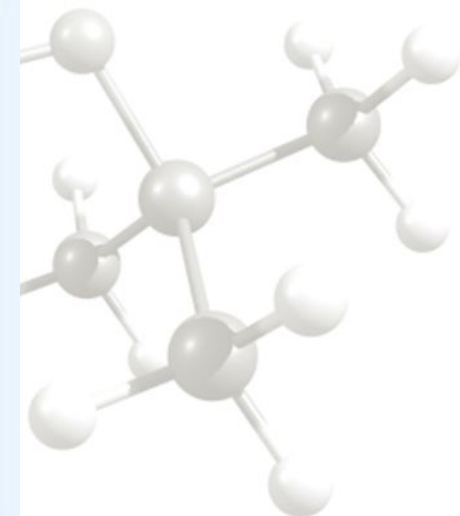
Матриця суміжності: етапи спрощення

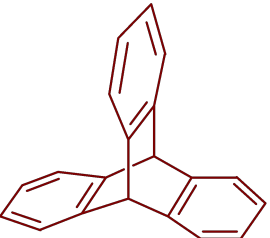


- Вилучення нулів
- Вилучення дублів
- Вилучення інформації про атоми Н

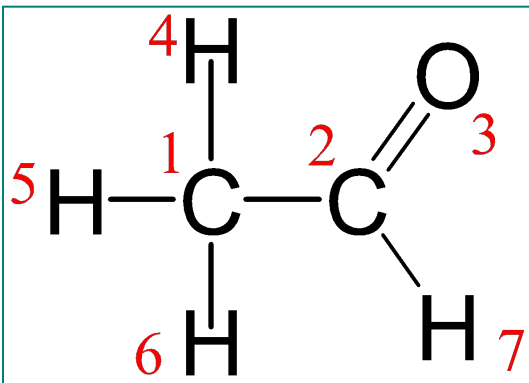
	1	2	3	4	5	6	7
1		1		1	1	1	
2			1				1
3							
4							
5							
6							
7							

	1	2	3
1		1	
2			1
3			





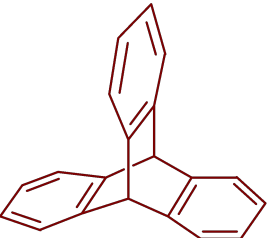
Матриця відстаней



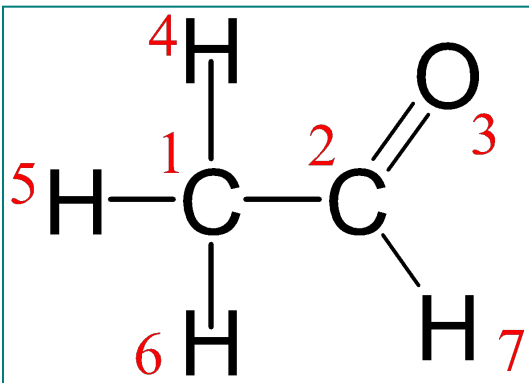
Геометричні відстані



	C1	C2	O3	H4	H5	H6	H7
C1	0	1.400	2.190	1.022	1.023	1.022	2.106
C2	1.400	0	1.123	1.999	1.982	1.999	1.022
O3	2.190	1.123	0	2.349	2.708	2.995	1.859
H4	1.022	1.999	2.349	0	1.668	1.661	2.895
H5	1.023	1.982	2.708	1.668	0	1.668	2.562
H6	1.022	1.999	2.955	1.661	1.668	0	2.336
H7	2.106	1.022	1.859	2.895	2.566	2.336	0



Матриця відстаней



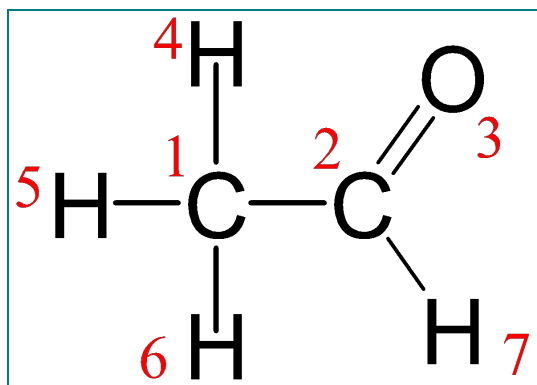
Топологічні відстані

	C1	C2	O3	H4	H5	H6	H7
C1	0	1	2	1	1	1	2
C2	1	0	1	2	2	2	1
O3	2	1	0	3	3	3	2
H4	1	2	3	0	2	2	3
H5	1	2	3	2	0	2	3
H6	1	2	3	2	2	0	3
H7	2	1	2	3	3	3	0



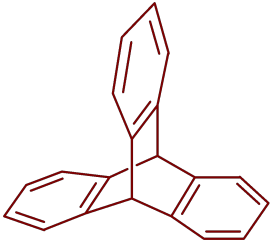
Таблиця зв'язків (Connection Table)

Відображення топології хімічної структури
(складу та зв'язків між атомами)
у формі таблиці

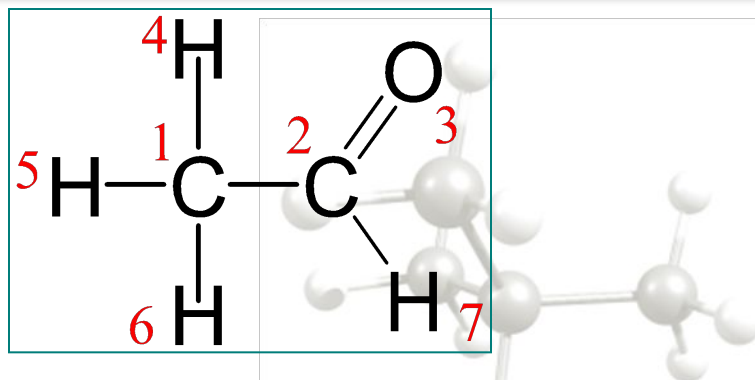


Список атомов	
1	C
2	C
3	O
4	H
5	H
6	H
7	H

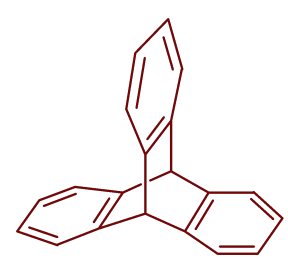
Список связей		
1-й атом	2-й атом	Порядок связи
1	2	1
2	3	2
2	7	1
1	4	1
1	5	1
1	6	1



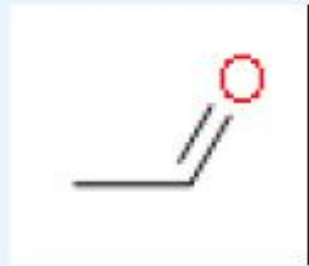
Таблиця зв'язків (Connection Table)



№	Атом	Сосед № 1	Порядок связи	Сосед № 2	Порядок связи	Сосед № 3	Порядок связи	Сосед № 4	Порядок связи
1	C	2	1	4	1	5	1	6	1
2	C	1	1	3	2	7	1		
3	O	2	2						
4	H	1	1						
5	H	1	1						
6	H	1	1						
7	H	2	1						



Mol – файл (2D-структура)



3 атома

2 связи

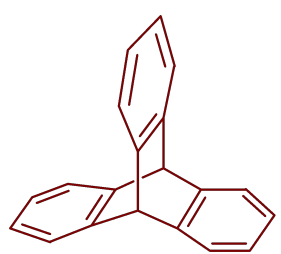
список атомов

иные параметры

```
SYNMXDraw 1201020342D
3 2 0 0 0 0 0 0 0 0 0999 V2000
4.7059 -6.9865 0.0000 C 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
5.5327 -6.9865 0.0000 C 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
5.9461 -6.2705 0.0000 O 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
1 2 1 0 0 0 0
2 3 2 0 0 0 0
M END
```

координаты
x, y, z

список связей



Mol – файл (2D-структура)

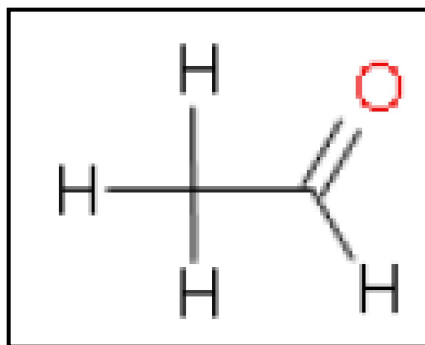
SMMXDraw01201020342D

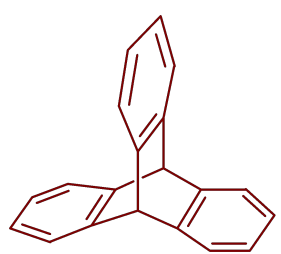
7 6 0 0 0 0 0 0 0 0999 V2000

4.9749	-5.2654	0.0000	H	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
5.7945	-4.4244	0.0000	H	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
5.8108	-5.9984	0.0000	H	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
5.8016	-5.2654	0.0000	C	0	0	3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
7.0418	-5.9814	0.0000	H	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
7.0418	-4.5494	0.0000	O	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
6.6284	-5.2654	0.0000	C	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

4	1	1	0	0	0	0
4	2	1	0	0	0	0
4	3	1	0	0	0	0
7	4	1	0	0	0	0
7	5	1	0	0	0	0
7	6	2	0	0	0	0

M END

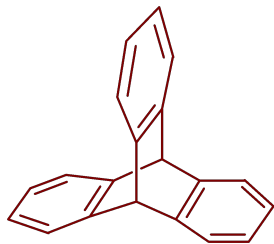




Mol – файл (2D-структура)

```
etanol.mol - AkelPad
Файл  Правка  Вид  Настройки  Справка
|
Mrv0541 10221321302D
6  5  0  0  0  0          999 v2000
-2.2688  0.9429  0.0000  C  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0
-3.0938  0.9429  0.0000  O  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0
-2.2688  0.1179  0.0000  H  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0
-1.4438  0.9429  0.0000  H  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0
-2.2688  1.7679  0.0000  H  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0
-3.5063  1.6573  0.0000  H  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0
1  2  1  0  0  0  0
1  3  1  0  0  0  0
1  4  1  0  0  0  0
1  5  1  0  0  0  0
2  6  1  0  0  0  0
M  END
1:1  Ins Win 1251 (ANSI - кириллица)
```

Структури Маркуша 1924

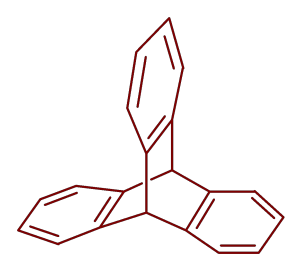


Євген А. Маркуш
1887 - 1968

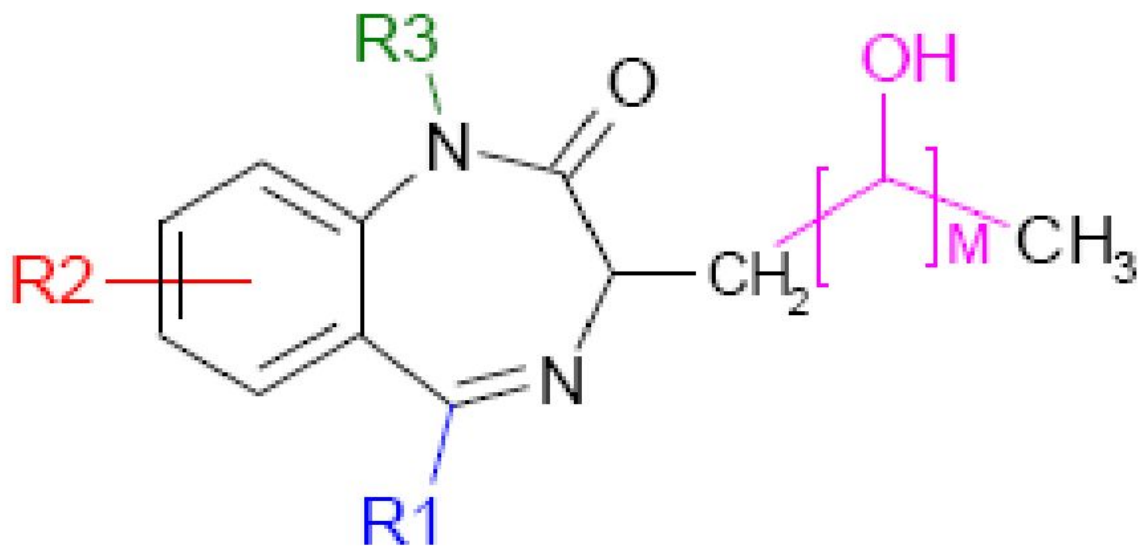
Pharma Chemical Corporation 1919

US patent 1506316

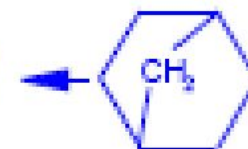
**Спосіб загального
відображення серії хімічних
сполук, що мають спільну
основну структурну частину, та
відрізняються замісником чи
структурним фрагментом**



Структури Маркуша



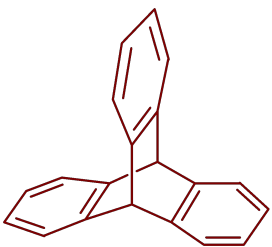
$R_1 = \text{propyl} / \text{CH}_3\text{CH}(\text{Br})\text{CH}_3 / \text{OMe}^* /$



$R_2 = \text{F}$

$M = 2-5$

$R_3 = \text{alkyl C1-6}$



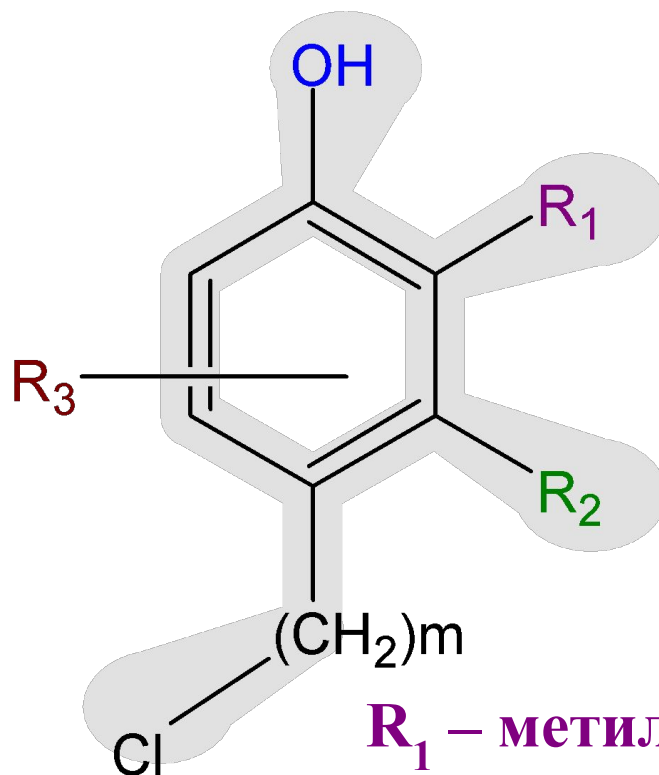
Структури Маркуша

***s*-варіація** – варіювання замісника:
різні можливі замісники наводяться
у вигляді окремого переліку
значень R-групи;

***p*-варіація** – варіювання
положення: використовується для
позначення можливих положень
замісників у структурі;

***f*-варіація** – варіювання частоти:
для позначення кількості
багаторазової появи даної групи у
структурі;

***h*-варіація** – варіювання гомологів:
для позначення груп, що
відрізняються на гомологічну
різницю.



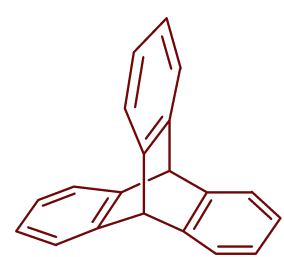
R_1 – метил або етил;

R_2 – алкіл;

R_3 – аміно-група;

***f*-варіація:**

$m = 1, 2, 3.$

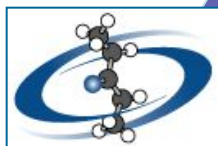


Редактори хімічних формул

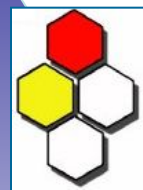
Chem Draw



**Chem
Scketch**



**Chem
Window**



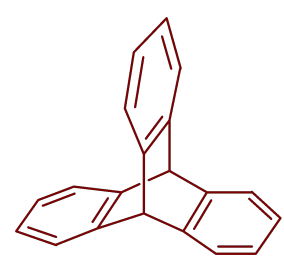
2D-рівень

**ISIS Draw
Accelrys Draw**



MarvinScketch





Редактори хімічних формул

ACD/ChemSketch (Freeware) - [noname01.sk2]

File Edit Pages Tools Templates Options Documents Add-Ons I-Lab ACD/Labs Help

Structure Draw [Icons] 156.5%

mm 20 30 40 50 60 70 80 90 100 110 120

A
Any
C
H
N
O
F
Na
Si
P
S
Cl
K

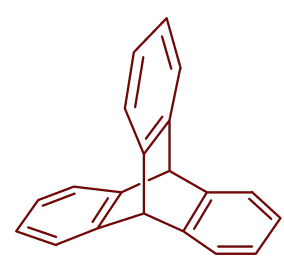
HO-CH₂-C(CH₃)₂-CH(OH)-C(=O)-NH-CH₂-CH₂-C(=O)OH

Vitamin B₅

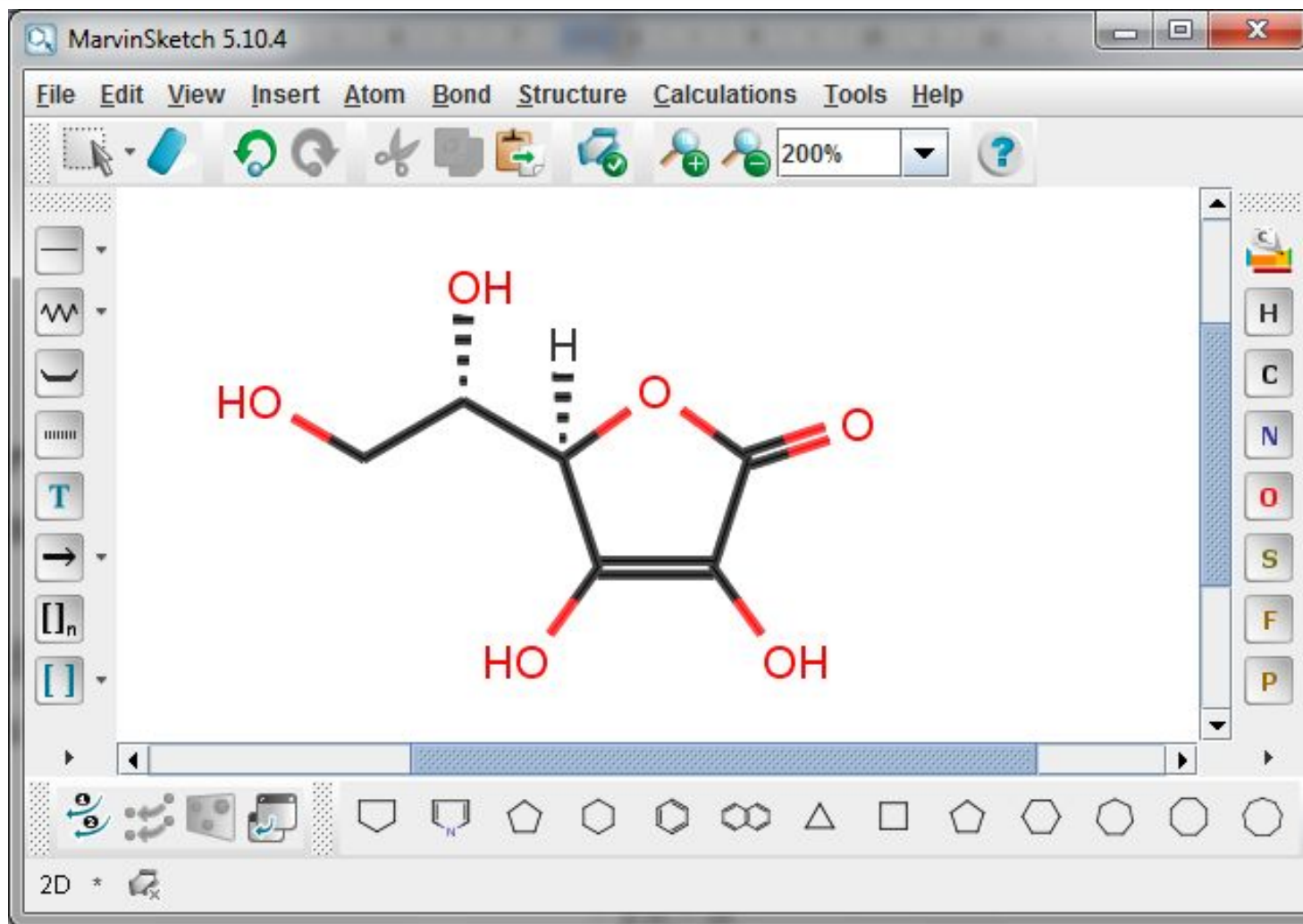
ACD/Labs RSS Feed: сен 9 00:00 ACD/Labs Announces the Release of ACD/ChemAnalytical Workbook | июл 3 00:00 ACD/Struc Setup RSS

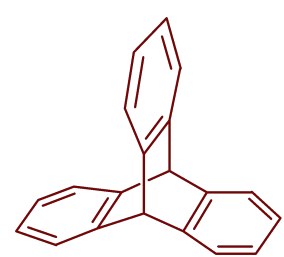
I-Lab Login NONAME01.SK2 Modified Page 1/1 Fragments: 1 C₉H₁₇NO₅ FW: 219.23498 Properties

1-ChemSketch 2-Database 3-ChemCoder

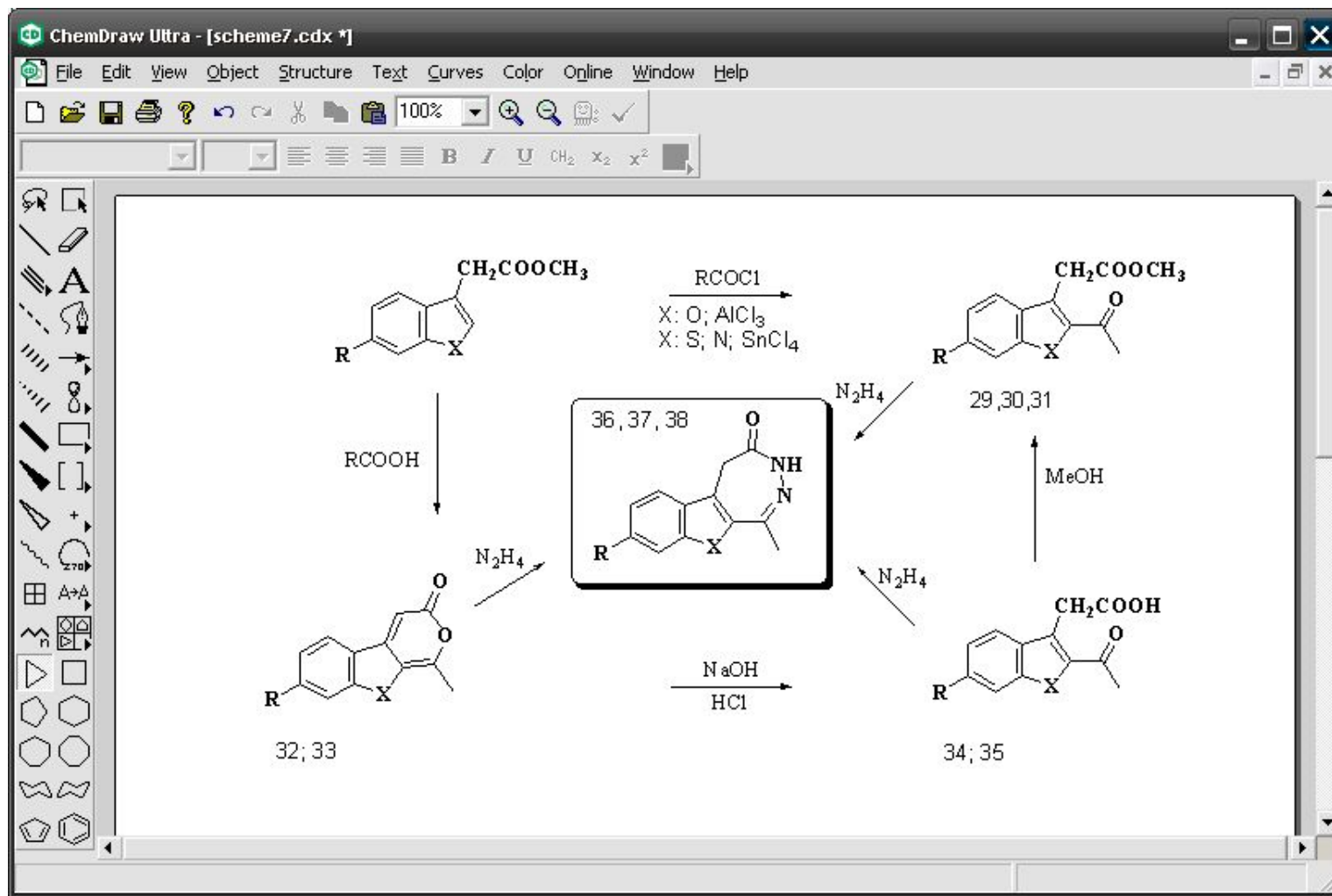


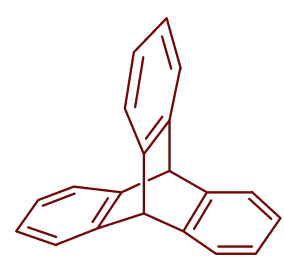
Редактори хімічних формул





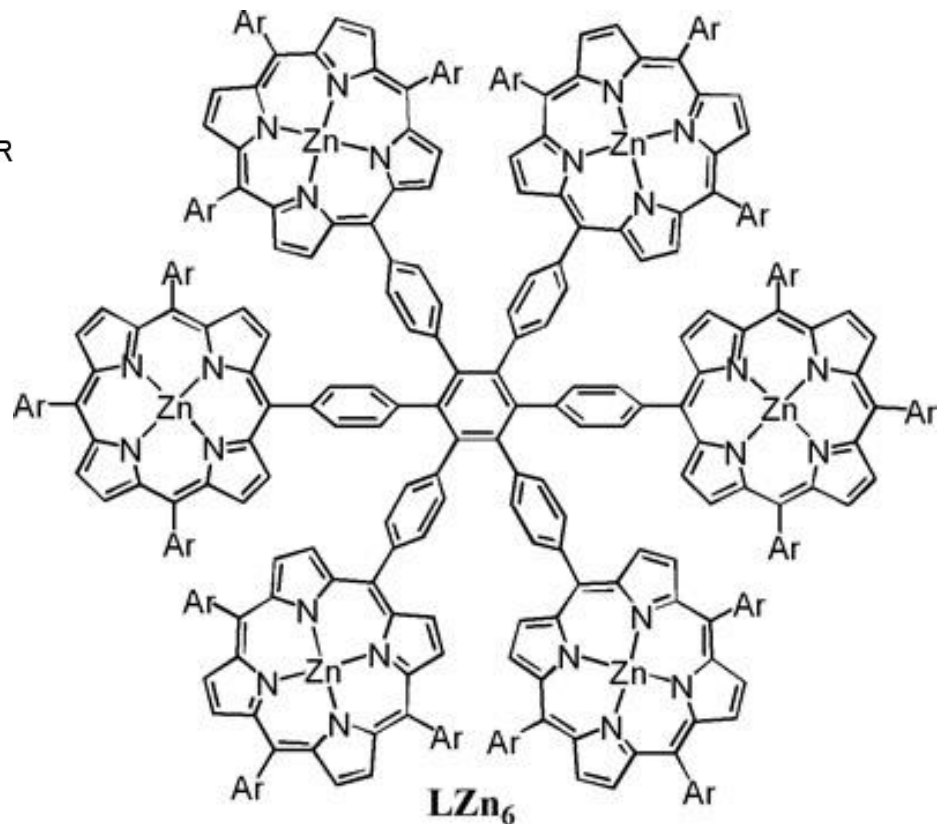
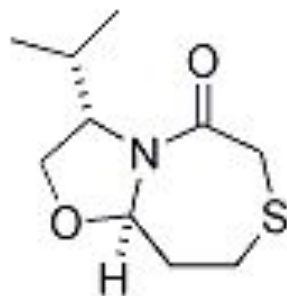
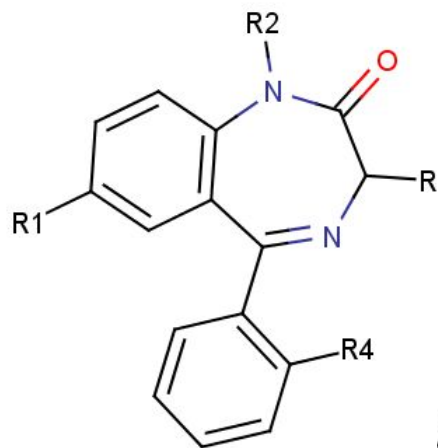
Редактори хімічних формул

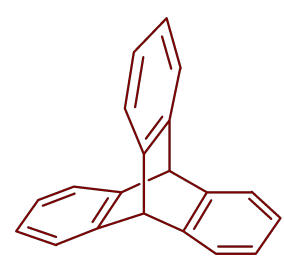




Редактори хімічних формул: ОСНОВНІ МОЖЛИВОСТІ

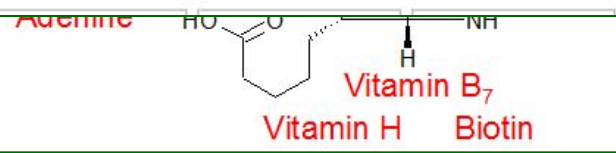
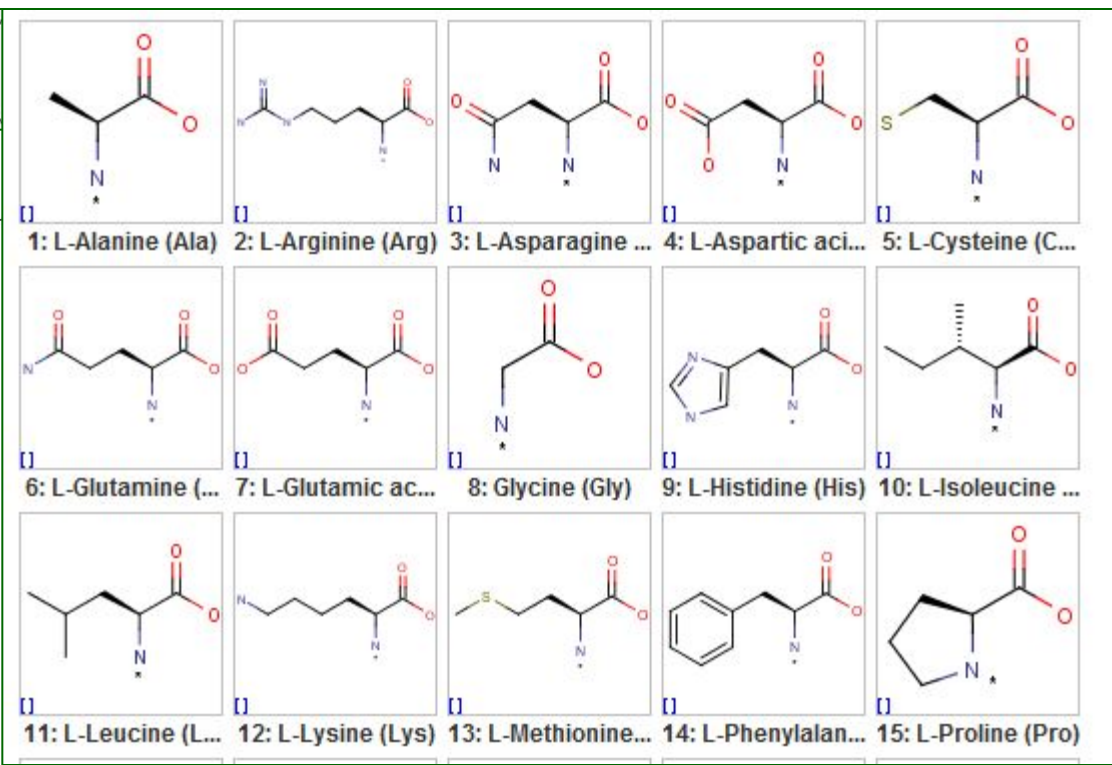
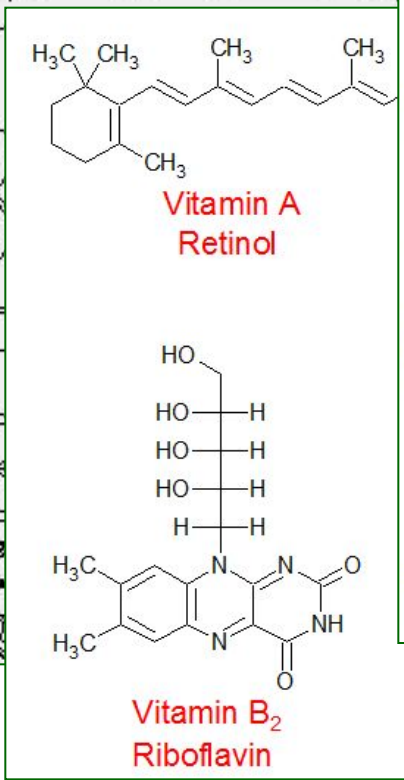
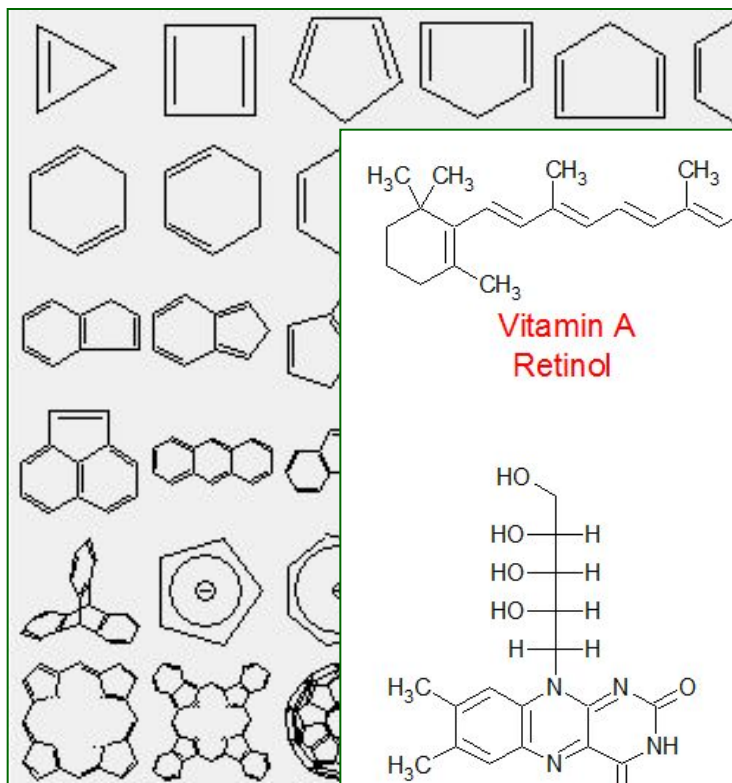
Створення структурних формул різної складності

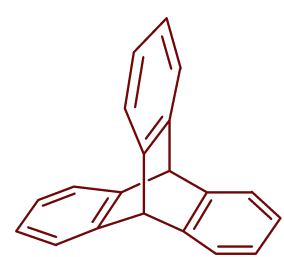




Редактори хімічних формул: ОСНОВНІ МОЖЛИВОСТІ

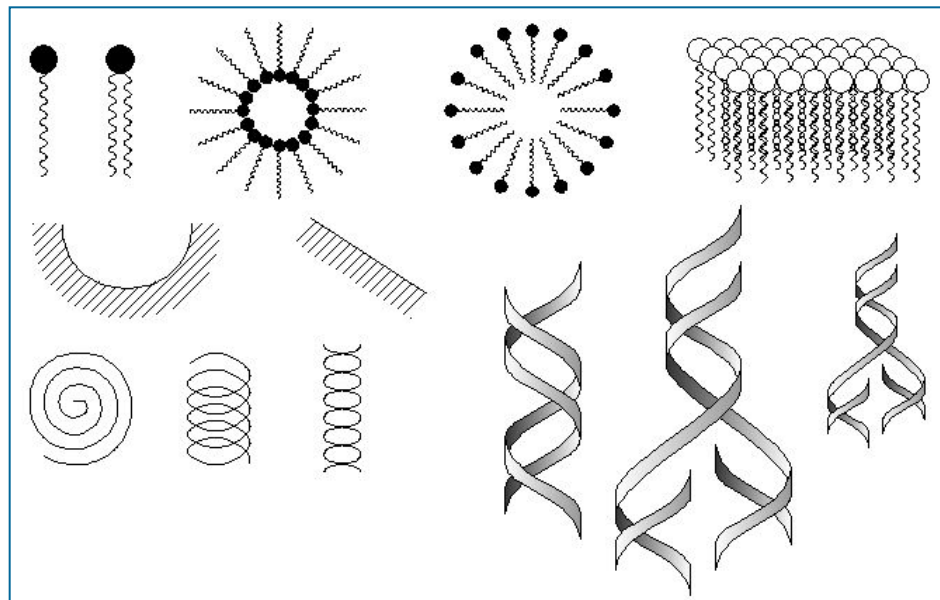
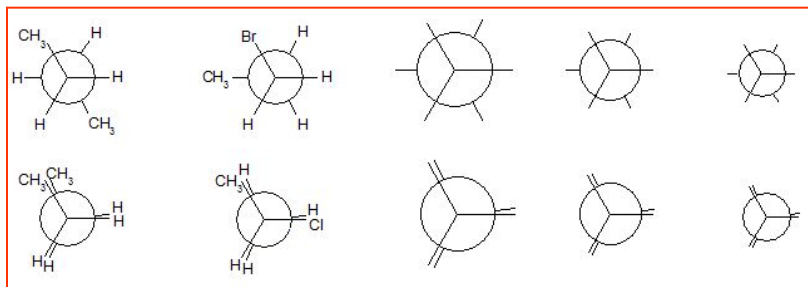
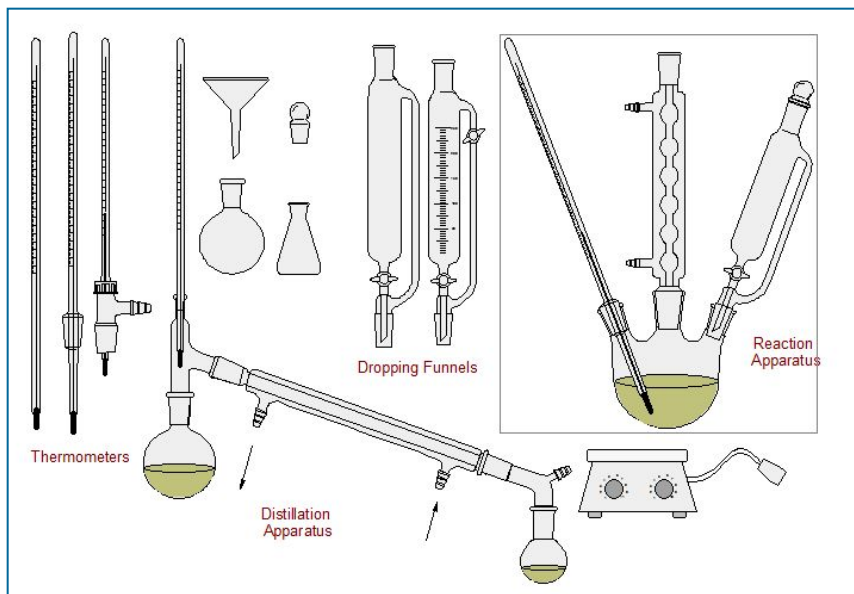
Використання шаблонів хімічних структур

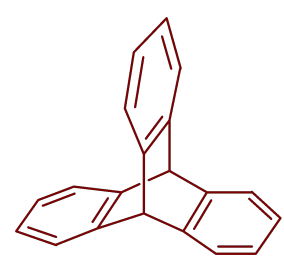




Редактори хімічних формул: ОСНОВНІ МОЖЛИВОСТІ

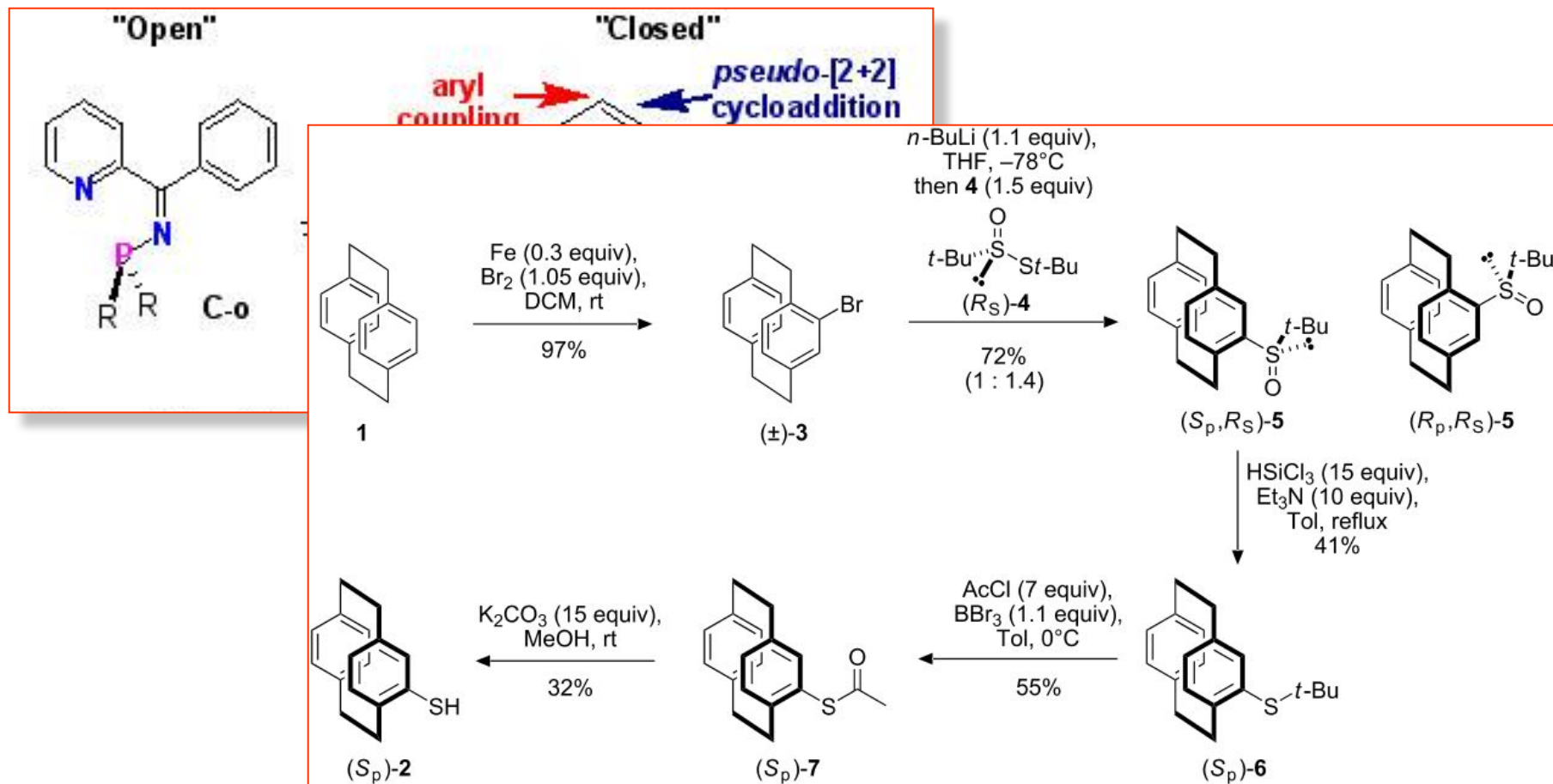
Використання шаблонів хімічної графіки

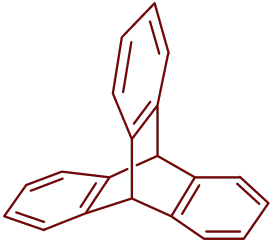




Редактори хімічних формул: ОСНОВНІ МОЖЛИВОСТІ

Створення схем хімічних реакцій різної складності





Редактори хімічних формул: ОСНОВНІ МОЖЛИВОСТІ

Копіювання та вбудовування об'єктів
у документи інших програм
Імпорт - експорт даних в різних форматах

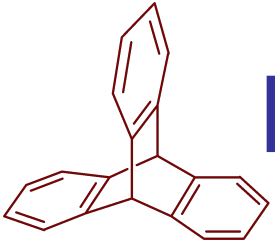
**skc, mol, ct, wmf, rxn,
sdf**



Gif, bmp, png, tiff

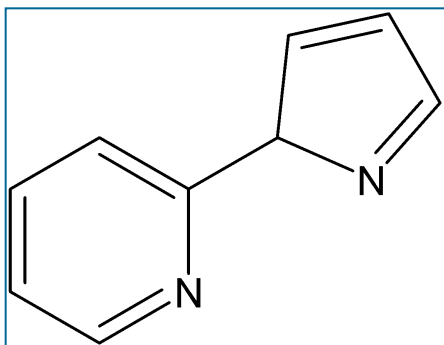
pdf

Cdx, jdx, sk2, mrv



Редактори хімічних формул: ОСНОВНІ МОЖЛИВОСТІ

Генерування характеристик речовин на основі їх
структурних формул



Chemical Properties

<input checked="" type="checkbox"/>	Boiling Point:	553,20 [K]
<input checked="" type="checkbox"/>	Melting Point:	372,61 [K]
<input checked="" type="checkbox"/>	Critical Temp:	768,74 [K]
<input checked="" type="checkbox"/>	Critical Pres:	44,62 [Bar]
<input checked="" type="checkbox"/>	Critical Vol:	442,50
<input checked="" type="checkbox"/>	Gibbs Energy:	387,88 [kJ/mol]
<input checked="" type="checkbox"/>	Log P:	0,95
<input checked="" type="checkbox"/>	MR:	45,30 [cm ³ /mol]
<input checked="" type="checkbox"/>	Henry's Law:	5,00
<input checked="" type="checkbox"/>	Heat of Form:	249,06 [kJ/mol]
<input checked="" type="checkbox"/>	CLogP:	-0.501
<input checked="" type="checkbox"/>	CMR:	4.5492

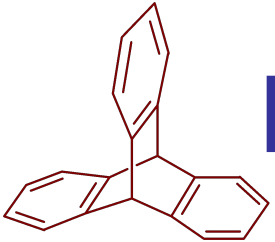
Paste Report

Analysis

<input checked="" type="checkbox"/>	Formula:	C ₉ H ₈ N ₂
<input checked="" type="checkbox"/>	Exact Mass:	144,07
<input checked="" type="checkbox"/>	Mol. Wt.:	144,17
<input checked="" type="checkbox"/>	m/e:	144.07 (100.0%), 145.07 (10.9%)
<input checked="" type="checkbox"/>	Elem. Anal.:	C, 74,98; H, 5,59; N, 19,43

Decimals: 2

Paste



Редактори хімічних формул: додаткові можливості



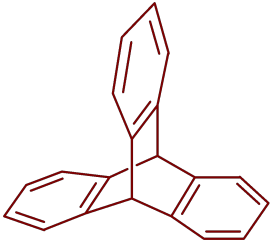
Генерування назви за ІЮПАК
номенклатурою

Генерування кодів SMILES,
InChI, SLN

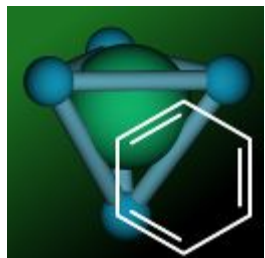
Генерування структур
таутомерів

Генерування 3D моделей

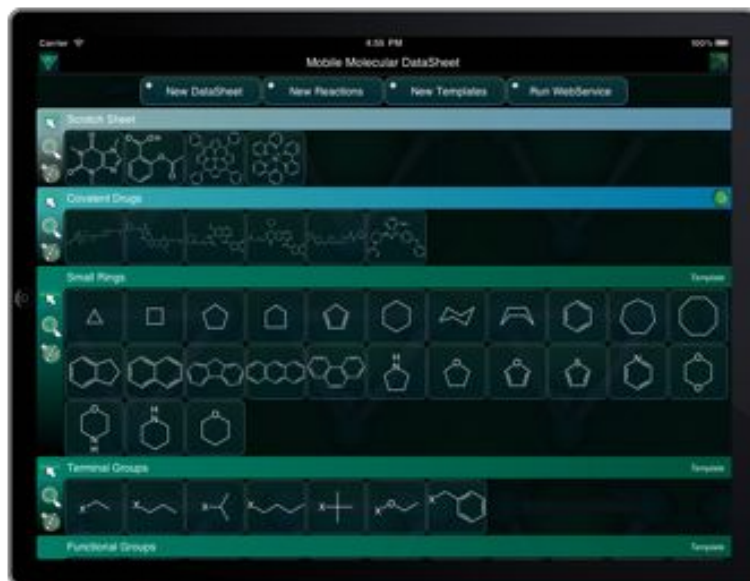
Генерування ЯМР спектрів

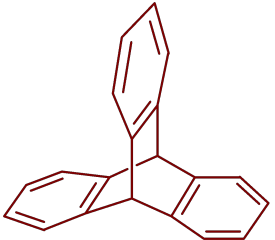


Мобільні засоби хімічної інформатики



Mobile Molecular DataSheet





Мобільні засоби хімічної інформатики



MolPrime



