



ХЕМИЈА НА ИНТЕРНЕТУ

Александар ДЕКАНСКИ, Владимир ПАНИЋ, ИХТМ – Центар за електрохемију, Београд и Драгана ДЕКАНСКИ, Галеника А. Д. - Институт, Земун

E-mail: dekanski@ihtm.bg.ac.yu, panic@ihtm.bg.ac.yu, ddekan@sezampro.yu



<http://www.organic-chemistry.org>

Први део овог наставка рубрике Хемија на интернету посвећујемо сајту *Organic Chemistry Portal* (www.organic-chemistry.org), који нуди преглед актуелних тема и интересантних реакција, као и информације о најзначајнијим хемикалијама у области органске хемије. Сајт се састоји од десет секција, од којих су две посвећене спонзорима (*Sponsored Links*) и партнерима (*Partner Web Sites*) сајта, једна пружа информације о контактима и могућностима комерцијалног рекламирања (*Imprint*), док су садржаји осталих седам секција стручно-научног карактера. Посебно ћемо представити сваку од њих.

Прва, најважнија и посебно истакнута секција нуди садржај бесплатаног електронског (online) часописа под именом *Organic Chemistry Highlights* (www.organic-chemistry.org/Highlights/), који објављује кратке прегледне чланке из области органске хемије и биохемије, органометалних једињења, микроталасне хемије, потпуне синтезе природних производа и вишеккомпонентних реакција. Динамика објављивања чланака је један чланак сваке недеље, а да би чланак био објављен неопходно је платити одређену суму, која се креће од 50 до 350 америчких долара, у зависности од врсте спонзорства која ће бити придружена чланку (50 долара уколико спонзорство обезбеђује менаџмент сајта, 200 уколико се чланак објављује без спонзорства и 350 уколико сам аутор жели да уз чланак објави и своју спонзорску поруку или рекламу). Као илустрацију наводимо наслове последња три чланка објављена у часопису крајем маја и почетком јуна месеца 2007. године: *Interconversion of Organic Functional Groups*; *Best Synthetic Methods: Carbon-Carbon Bond Formation*, *The Overman Synthesis of (-)-Sarain A*, чији је аутор Douglass F. Taber.

У оквиру часописа до сада је објављена једна серија чланака из области **Вишеккомпонентних реакција** (4 чланка током 2005. године аутора Alexandera Doemlinga - www.organic-chemistry.org/Highlights/mcr.shtm), а у току је објављивање још две серије чланака из области **Микроталасне хемије** (од 2004. године до сада објављено је 38 чланака више аутора - www.organic-chemistry.org/Highlights/microwave.sh

tm) и **Потпуне синтезе** (41 чланак Douglassa F. Tabera од 2004. године - www.organic-chemistry.org/Highlights/totalsynthesis.shtm).

Секција под именом **Органске реакције** (*Organic Reactions*) подељена је на четири области

Name Reactions - садржи информације о најзначајнијим органским реакцијама као и кључне речи на пољу органске синтезе

Преглед реакција по врсти успостављене везе (*Browse Reactions by bond formation*) – Помоћу графичких симбола врста веза могуће је претраживати одређене трансформације и пронаћи примере који могу помоћи у решавању проблема током различитих синтеза.

Заштитне групе (*Protecting Groups*) – подаци о стабилности најзначајнијих група и методама њихове заштите, и

Специјалне теме (*Special Topics*), у које су укључене области Микроталасне синтезе (*Microwave Synthesis*), Вишеккомпонентних реакција (*Multicomponent Reactions*) и Органокатализа (*Organocatalysis*).

Секција **Абстракти** (*Abstracts*) нуди линкове ка абстрактима најновијих чланака у области органске синтезе, објављеним у најцењенијим часописима из области органске хемије. За сваку синтезу приказана је кључна реакција или схема синтезе, а кликом на њу приступа се абстракту чланка, уз који је наведена и адреса (линк) на којој се налази комплетан рад.

Хемикалије (*Chemicals*) је секција у оквиру које је могуће претраживати целокупну *Chemexper Chemical Directory* (CCD) базу података са тренутно 1.441.210 хемикалија у њој. Претраживање је могуће по молекулској формули, IUPAC имену, тривијалном имену, CAS броју, каталожном броју и структурним или физичким карактеристикама. Поред овога, у овој секцији се могу пронаћи и основне информације и преглед најновије литературе о оксидујућим и редукујућим агенсима (*Oxidizing* и *Reducing Agents*), као и елементарне информације и јонским течностима (*Ionic Liquids*).

Секција **Хемијски алати** (*Chemistry Tools*) је уствари приступ интерактивном (online) програму

OSIRIS Property Explorer, који омогућава цртање хемијских структура уз предвиђање њихових основних својстава. Тако се за валидно нацртану структуру могу добити предвиђања токсиколошких ризика са становишта коришћења супстанце као лека (мутагеност, канцерогеност, репродуктивни ефекат. . .), као и нека основна (молекулска маса, растворљивост, *cLogP*. . .) својства супстанце. При томе, уколико су потенцијална својства опасна или ризична, оне ће бити исписана црвеном бојом, док зелена боја означава својства које нису ризична са становишта коришћења супстанце у медицини. Секција садржи и кратке приручнике који могу бити од помоћи при тумачењу и разумевању предвиђених својстава нацртаних хемијских структура (*Toxicity Risk Assessment, cLogP Prediction, Solubility Prediction, Molecular Weights, Fragment Based Druglikeness Prediction, Overall Drug-Likeness Score*).

Секција **Књиге о хемији** (*Chemistry Books*), као што се може и претпоставити, даје приказе одабраних монографских или уџбеничких издања из обла-

сти органске хемије и сродних хемијских дисциплина. Све представљене књиге су подељене у три области: Органска хемија, Аналитичка хемија и Медицинска хемија, са подобластима у свакој од ових. За сваку књигу сем наслова, имена аутора, назива издавача, ISBN броја и података о обиму и години издавања, дат је и кратак приказ садржаја и коментар уредника књиге. За већину представљених издања могуће је наћи и информацију како се и где књига може купити и по којој цени.

Секција **Извори** (*Resources*) представља богату збирку линкова ка Интернет страницама са садржајима блиским садржају сајта. Основна подела ове секције је на **Хемијске изворе** (*Chemistry Resources*) и **Испоручиоци** (*Suppliers*). Први су подељени на опште и посебне, по гранама хемије, а други обухватају испоручиоце хемикалија, литературе, опреме и инструмената, база података, софтвера и сл. Хемијски извори обухватају: образовање, претрагу литературе, хемикалије, хемијске књиге, речнике, часописе, новости и сл.



<http://www.webreactions.net>

Други део рубрике у овом броју посвећујемо кратком приказу једног занимљивог, необичног и, за органске хемичаре, врло корисног сајта. У питању је *OnLine* претраживање прилично обимне базе хемијских реакција, али за разлику од класичног претраживања, принцип овог је заснован на променама у везама које се дешавају током реакције. Познато је да када органски хемичар, или још прецизније синтетичар, размишља о реакцији, првенствено мисли на кидање и стварање веза у реакционом центру, што у суштини дефинише природу реакције. Он тада разматра ефекте околних група, на пример на брзину реакције, или да ли оне ометају или блокирају промене под задатим реакционим условима. Програм *WebReactions* полази од тог приступа при претраживању реакција које се налазе у бази података. Тако се захтев за претраживање базе поставља као врста реакционих промена које се очекују, а за одговор се добијају групе реакција које задовољавају тражени постављени критеријум. На тај начин се добијају веома брзи одговори, који занемарују све структуре које евентуално могу бити присутне у реактантима, а које остају непромењене током реакције. Тиме се значајно сужава област за евентуална даља претраживања.

У оквиру *WebReactions*, уноси у бази су таксативно индексирани, са следећим сукцесивно груписаним критеријумима:

- Стриктна подела класа и типова реакција,
- Природа субституције у околини реакционог центра,
- Природа «улазећих» и/или «одлазећих» група,
- Делови реактаната који остају непромењени током реакције.

Тражена реакција се у захтев уноси са онолико детаља колико то жели корисник. Једини услов је да се дефинишу сви атоми чије се везе мењају током реакције, тј. атоми који чине реакциони центар.

Програм затим формулише могуће реакције под истим условима како су реакције унете у базу података и одмах лоцира све уносе истих карактеристика са траженом реакцијом, а број «погодака» приказује на екрану.

Уствари, *WebReactions* подешава критеријуме претраге толико дуго колико је потребно да добије између 10 и 20 «погодака», колико би требало да буде довољно да корисник пронађе жељену реакцију. Наравно, остаје могућност даљег детаљнијег претраживања.

На самом сајту налази се детаљно упутство и приручник за коришћење програма, али доста тога се може научити и након пар покушаја тражења неких познатих и једноставнијих реакција. Тиме се стиче увид у то како програм ради и «размишља», па се део приручника и упутства може и прескочити.

На крају треба напоменути да је за коришћење програма неопходно имати Java подршку (*Java-enabled*) инсталирану у оквиру програма за приступ Интернету.

На сајту се налази и *Trouble Shooting Page* са детаљним списком програма за приступ Интернету (*Web Browsers*) који подржавају програм, као и са описом, објашњењима и решењима најчешћих проблема који се јављају при коришћењу програма. На истој страни се налазе и информације о инсталирању *Java Runtime Environment (JRE)* у све најпопуларније Интернет програме.