

Internet a chemie

Luděk Jančář, Ivan Lukáš

Motto:

„ Buď ku prospěchu společnosti ! “
Jan Amos Komenský

1. Úvod

2. Chemie na Webu

- 2.1 Kluby chemiků, diskusní skupiny chemiků
- 2.2 Chemické meta stránky
- 2.3 Chemické časopisy
- 2.4 Aktuální zprávy z chemie
- 2.5 Chemické knihy
- 2.6 Chemické konference
- 2.7 Vizualizace, modelování, simulace
- 2.8 Chemické manuály
- 2.9 Chemické databáze
- 2.10 Virtuální chemické knihovny
- 2.11 HTML pro chemiky
- 2.12 Chemici hledají zaměstnání
- 2.13 Chemický obchod
- 2.14 Chemikálie
- 2.15 Usenet News pro chemiky
- 2.16 Další zajímavé chemické odkazy
- 2.17 Výuka chemie

3. Závěr

4. Literatura

1. Úvod

Následující stránky chtějí poskytnout základní informace o službách Internetu, které může chemik, učitel chemie, žák nebo student využít v chemické práci (zejména služby World Wide Web). Zvláště pak chce zmínit nejdůležitější a nejnovější poznatky, odkazy a internetové adresy ze všech oblastí chemie.

Práce rozděluje oblast chemie na Internetu do řady oblastí a zaměřuje se na nejdůležitější chemické odkazy a jejich adresy, možnosti, použití a význam, hodnotí prezentace nejnovějších objevů a poznatků v chemii, uvádí odkazy na několik „free“ verzí programů (tj. programů volně šiřitelných) a pokusí se čtenáře seznámit s mnoha dalšími zajímavostmi určenými všem přívržencům chemie.

Při zpracovávání této práce bylo využito výsledků studia a analýzy vybrané literatury [1 – 3] z oblasti informačních technologií a chemie, počítačové sítě Internet a jejích služeb, převážně World Wide Web (WWW) a počítačové techniky.

2. Chemie na Webu

V práci [4] byly podrobně rozebrány jednotlivé služby Internetu jako: E-mail, Telnet, World Wide Web. Nejvíce používanou službou na Internetu i pro chemika či učitele chemie je World Wide Web. Takže hlavní pozornost bude věnována právě této službě a jejímu využití pro chemika.

Chemie není jen text, ale také grafika, animace apod. Chemici potřebují aktuální informace, obchodní informace apod. Z tohoto pohledu má chemie k Webu velmi blízko. Zkusme tedy probrat některé konkrétní možnosti Webu v chemii.

2.1 Kluby chemiků, diskusní skupiny chemiků

Máme-li přístup k Webu a jsme-li chemiky jakékoliv generace, je užitečné se přihlásit do webovského klubu chemiků ChemWeb. Členství v klubu je volné. Klub sídlí na Web adrese <http://chemweb.com>.

Jak probíhá přihlašování? Nejdříve se zaregistrujeme. Aktivujeme *FREE MEMBERSHIP Join*, kde vyplníme elektronický formulář. Jde o osobní údaje, zájmy, volbu uživatelského jména, hesla apod. Formulář odešleme a tím se staneme členy klubu. Do klubu se již potom hlásíme jako řádní členové svým **uživatelským jménem** a **heslem** (*Member's login* na výše uvedené Web stránce).

Proč je členství v klubu užitečné? Klub shromažďuje různé programy užitečné pro chemiky, které můžeme přehrát a instalovat (volně) ve vlastním počítači. Může to být např. nová verze programů Netscape, Explorer, Acrobat, program CHIME pro prohlížení 3D modelů chemických sloučenin získaných z databází, program ISIS pro kreslení chemických struktur apod. Volně přístupná je zde rovněž řada databází včetně např. databáze Beilstein Abstracts. Důležitá je také skutečnost, že klub má také Web stránku s přehledem volných míst pro zájemce o zaměstnání. Najdeme ji na adrese <http://chemweb.com/jobs/>.

ChemWeb není jediná klubová aktivita chemiků na Webu. Jiným klubem chemiků je např. ChemClub.com, přístupný na Web adrese <http://www.camsoft.com/chemclub/>. Jde o podobně otevřený klub jako ChemWeb. Registrovat se již umíme. Další možností, kde chemici mohou „trávit volné chvíle“ a dozvědět se přitom užitečné věci je chemsoc (*the Chemistry Societies Network*) na Web adrese <http://www.chemsoc.org/>.

Diskusních skupin, orientovaných k chemii, je poměrně mnoho. Jejich seznam získáme, např. pošleme-li na elektronickou adresu MAILSERV@ccl.osc.edu dopis obsahující text:
select chemistry
get info/electronic-lists/chemistry-related-lists
quit .

Uvedený seznam můžeme najít také na Web adrese:
<http://biomr1.rug.ac.be/chemistry/overview.html> .
Podrobný seznam je i na Web adrese:
<http://www.gu.edu.au/gint/ozlists/othref.html> .

2.2 Chemické meta stránky

Meta stránky (*Meta pages*) shromažďují zdroje hyperspojení na význačné Web stránky v daném oboru. Jsou jejich katalogy. Meta stránkám se také říká webovské zdroje (*Web Resources*).

Obecně internetovské zdroje (*Internet Resources*), obsahují-li meta stránky kromě hyperspojení na dokumenty Webu také zdroje hyperspojení související s jinými službami, např. na FTP servery, zdroje Telnetu apod. Co se týče chemie, existuje řada takových chemických meta stránek. Jsou skutečnými pokladnicemi vědomostí o tom, co je na Webu (a Internetu obecně) o chemii k dispozici. Pokud děláme sondu o jakékoliv zájmové oblasti v chemii, začínáme zpravidla od webovských zdrojů. V nich najdeme základní odkazy na startovní stránky v dané oblasti, od kterých odvíjíme další profesionální zájem. Ve webovských zdrojích najdeme hyperspojení počínaje molekulami, sloučeninami, databázemi, časopisy, knihami, univerzitami, komerčními místy, nápady, tipy, demonstracemi, virtuálními knihovnami apod. Někdy jsou pojaty jako celosvětové, jindy jsou zaměřeny pouze na určitou zemi. Následuje několik Web adres známých webovských zdrojů určených chemikům:

- <http://acad.udallas.edu/www/chemdept/bestweb.html> – doporučeno (výběr The best of 1995),
- <http://hackberry.chem.niu.edu/cheminf.html> ,
- <http://ellinfon.pharmacy.arizona.edu/~bear/chem.html> ,
- <http://chemistry.miningco.com/> ,
- <http://chemweb.com/> ,
- <http://journals.wiley.com/0192-8651/sires.html> ,
- <http://library.adelaide.edu.au/guide/sci/Chemistry/index.html> ,
- <http://vm.cfsan.fda.gov/~dms/chemist.html> ,
- <http://www.cfsan.fda.gov/~dms/chemist.html> ,
- <http://www.claessen.net/chemistry/> ,
- <http://www.cm.utexas.edu/groups/mcdevitt/Links/BasicChemistry.html> ,
- <http://www.cpb.uokhsc.edu/pharmacy/> ,
- <http://www.dfst.csiro.au/fdnet20c.htm> ,
- <http://www.fiz-chemie.de/WWW/> ,
- <http://www.fiz-karlsruhe.de/fiz/science/chemie/> ,
- <http://www.geocities.com/Tokyo/5243/> ,
- <http://www.chem.ucla.edu/chempointers.html> ,
- http://www.chemie.fu-berlin.de/chemistry/index_en.html ,
- <http://www.chemie.upce.cz/great.htm> – české chemické metastránky,
- <http://www.chemsoc.org/crl/links.html> ,
- <http://www.chemsources.com/chemlinks.html> ,
- <http://www.indiana.edu/~cheminfo/> ,
- <http://www.ingenlabs.com/chem.html> ,
- <http://www.latrobe.edu.au/www/webchem/> ,
- <http://www.liv.ac.uk/Chemistry/Links/links.html> ,
- <http://www.members.freepage.de/chemistry/> ,
- <http://www.nhmfl.gov/~weiqun/chemistry.html> ,
- <http://www.rpi.edu/dept/chem/cheminfo/chemres.html> ,
- http://www.rpi.edu/dept/chem/cheminfo/chemres/chemres_08.html ,
- <http://www.shef.ac.uk/~chem/chemdex/> ,
- <http://www.yahoo.com/Science/Chemistry/> ,
- <http://www-chem.harvard.edu/webchemistry/webchem.html> ,

Pravděpodobně nejznámějšími a nejnavštěvovanějšími chemickými meta stránkami jsou stránky na Web adrese:

<http://www.claessen.net/chemistry/>

(tzv. *Claessenův* seznam). Lze je jedině doporučit. Pro svoji obsažnost a profesionální provedení lze také doporučit meta stránky:

<http://www.fiz->

[karlsruhe.de/fiz/science/chemie/1pagegif.htm](http://www.fiz-karlsruhe.de/fiz/science/chemie/1pagegif.htm) .

Na výše uvedených meta stránkách naleznou chemici snad všechny informace z mnoha oblastí chemie. Každý jistě objeví ty „pravé“, které mu budou vyhovovat. Jde o pěkný příklad otevřeného konkurenčního prostředí. Web stránky soutěží o přízeň čtenářů a tato soutěž má fair pravidla.

Co se týče českých katalogů Web stránek, je třeba zmínit ještě jednou sídlo s adresou <http://chemie.upce.cz/> , které spadá pod Univerzitu Pardubice. Můžeme tam nalézt meta stránky Česká chemie na Internetu. Jde o přehled zdrojů hyperspojení na český chemický výzkum, akademické instituce, chemický průmysl, volná místa apod. Jinými českými meta stránkami jsou např.:

- <http://web.telecom.cz/scitech/stlinky.htm> ,
- <http://www.scitech.cz/stlinky.htm> ,
- <http://www.upce.cz/~slchpl/chemie.htm>

- <http://esther.la.asu.edu/sas/journal.html> (Applied Spectroscopy Journal),
- <http://chemistry.mond.org/> (Chemistry Today),
- <http://jchemed.chem.wisc.edu/> (Journal of Chemical Education),
- <http://journals.wiley.com/> ,
- <http://org.chem.msu.su/KhGS/index.htm> (Chemistry of Heterocyclic Compounds),
- <http://pubs.acs.org/journals/inocaj/index.html> (Inorganic Chemistry),
- <http://tqd.advanced.org/3659/> (CHEMystery),
- <http://www.elsevier.com/> ,
- <http://www.elsevier.com/inca/homepage/saa/theochem/frames.shtml> (Theochem),
- <http://www.ijc.com/> (Internet Journal of Chemistry),
- <http://www.impub.co.uk/ems.html> (European Mass Spectrometry Journal),
- <http://www.ipfw.indiana.edu/chem/journ.htm> ,
- <http://www.chem.msu.su/eng/journals/jvho/index.html> (Mendeleev Chemistry Journal),
- <http://www.chemweek.com/> (Chemical Week),
- <http://www.publish.csiro.au/journals/ajc/index.html> (Australian Journal of Chemistry),
- <http://www.teamworks.co.uk/ijvs/> (Internet Journal of Vibrational Spectroscopy).
- <http://www.yahoo.com/Science/Journals/> .

Z českých časopisů jsou to např.:

- Bulletin české společnosti chemické (<http://uochb.cas.cz/bulletin.html>),
- Collection of Czechoslovak Chemical Communications (<http://cccc.uochb.cas.cz>)
- CHEMagazín (<http://chemie.upce.cz/chemmagazin/>),
- Chemické listy (<http://www.uochb.cas.cz/ChemListy/chemlistycz.html>),
http://staff.vscht.cz/chem_listy ,
- Učitel'ské listy (<http://it.pedf.cuni.cz/~uclisty/>), apod. Lze tam nalézt i celé časopisy.

a také sympaticky laděný seznam <http://risc.upol.cz/~riege/> , neboť chemik má i jiné záliby.

2.3 Chemické časopisy

Mnoho chemických časopisů má vlastní Web stránky. Zveřejňují se na nich doplňující informace týkající se časopisu. Jsou to např. abstrakty článků v jednotlivých číslech, obsah, diskuse k jednotlivým článkům, odpovědi na časté otázky, vzkazy, barevné obrázky (barevné časopisy jsou nákladné), různé animace (např. rotace molekul), videozáznamy apod. Za přístup k jednotlivým článkům již zpravidla musíme zaplatit. Např. časopis Protein Science na adrese <http://www.prosci.uci.edu/> (jde pravděpodobně o první chemický časopis využívající možnosti Webu). Prostřednictvím tzv. *kinemage* je zde možné získat graficky znázorněné struktury různých proteinů. Dalšími takovými časopisy, které na různé úrovni kombinují možnosti Webu a tištěné formy, jsou *Journal of Biological Chemistry*, *Multimedia Journal of Chemical Education* s možností ilustrovat postupy výuky pomocí videa, *Chemistry & Industry*, *Journal of Molecular Modelling*, *Journal of Physical Chemistry*, *Journal of Computational Chemistry* apod.

Zdroje hyperspojení nalezneme na meta stránkách např.:

Celkově lze říci, že kombinace tištěné a „webové“ podoby časopisů se zdá být velmi dobrá. Jako příklad takového dobrého „soužití“ lze uvést zvláště široce čtený týdeník *Chemical Week* a jeho webovou podobu na adrese

<http://www.chemweek.com/>, kde se můžeme dozvědět řadu dalších aktuálních, případně doplňujících informací. Jinou užitečnou kombinací je tištěná forma doprovázená kompaktnější elektronickou podobou na CD-ROM a to zvláště u časopisů uveřejňujících informace stále stejného charakteru (např. typy chemických reakcí, popisy chemických sloučenin, abstrakty článků apod.). Postupně tak vznikají databáze např. chemických reakcí, chemických sloučenin, abstraktů článků. Zde je kombinace CD-ROM výhodná, neboť jedna CD-ROM pojme několik časopisů. Příkladem časopisu kombinujícího tištěnou formu s CD-ROM

je např. populární *ChemInform* (dříve známý jako *Informationdienst*), který vychází současně v tištěné formě (vydává Wiley-VCH, <http://www.wiley-vch.de/vch/journals/>) a na CD-ROM. Vydavatelem je FIZ Chemie (*Fachinformationszentrum Chemie*), viz Web adresa:

<http://www.fiz-chemie.de/index.e.html>.

Ovšem k čistě elektronické podobě časopisů existuje jistý všeobecný uživatelský odpor.

2.4 Aktuální zprávy z chemie

Kromě časopisů existuje řada webovských míst, kde se můžeme dočíst aktuální informace z různých oblastí chemie. Zde je několik Web adres s těmito místy:

- <http://chemie.upce.cz> (Česká chemie),
- <http://chemistry.rsc.org/rsc/> (Royal Society of Chemistry),
- <http://pubs.acs.org/cen/index.html> (Chemical Online),
- <http://www.ei.org> (Engineering Information, Inc.),
- <http://www.fiz-chemie.de/news/> (FIZ Chemie),
- <http://www.chemexpo.com/> (chemEXPO),
- <http://www.chemie.de/> (Chemie.De),
- <http://www.chemistry.de/index.e.html> (FIZ Chemie),
- <http://www.chemnews.com> (novinky ve světové chemii),
- <http://www.chemweek.com> (Chemical Week).

2.5 Chemické knihy

Prostředí Webu umožňuje publikovat elektronické knihy bez nákladů na distribuci, skladování, tisk. Knihu vytiskne uživatel, má-li zájem. To je však zatím ideální případ. Většinou nakladatelé publikují obsahy knih a souhrn jednotlivých kapitol. To je velmi užitečná informace, chceme-li knihu koupit. Zde jsou adresy některých známých vydavatelů:

- <http://www.elsevier.nl/>,
- <http://www.mcgraw-hill.com/>,
- <http://www.wiley.com/> atd.

Co se týče českých nakladatelství, je jich na Webu řada, stačí v jakémkoliv hledači, např. Seznamu, zvolit klíčové slovo „nakladatelství“. Zajímavou možnost nabízí McGraw-Hill v podobě tzv. **beta knih** (*Beta Books*). Na Webu tam zveřejňují knihy před jejich vydáním. Je možné knihu prostudovat (zdarma) a připomínkovat. Beta knihy lze nalézt na internetové adrese <http://www.betabooks.mcgraw-hill.com/>. Další možností, která se hojně využívá, je možnost na Webu zveřejnit opravy, doplňky apod. k již vydaným knihám. V takové knize je uvedena Web adresa, kde může čtenář nalézt tyto informace. Další

vítanou možností Webu je publikování slovníků nebo encyklopedií. Např. Webstrův slovník můžeme nalézt na internetové adrese http://philby.ucsd.edu/cgi-bin/http_webster/ nebo <http://www.m-w.com/> (*Merriam-Webster Online*). Katalogy chemických publikací jsou na adrese: <http://www.rpi.edu/irc/chemres/chemres01.html>.

2.6 Chemické konference

Mechanismus Webu je velmi vhodný pro organizování konferencí. Prakticky každá konference má dnes svou vlastní Web stránku s informacemi o organizaci a průběhu konference a zveřejněnými příspěvky. Chemik může tedy využít Internetu pro přehled o konání konferencí, kongresů, seminářů a jiných setkání a akcí a to jak zahraničních, tak i domácích. Může také navštívit příslušné WWW stránky jednotlivých chemických konferencí.

Na WWW stránce <http://www.ans-linz.ac.at/Schule/Chemie/chemie.htm> pod odkazem „Veranstaltungen und Termine“ (Akce a termíny) je stále aktualizovaný seznam připravovaných konferencí a seminářů pro učitele chemie, který je rozdělen na akce konané v Rakousku a v zahraničí.

Zvláštním případem jsou čistě elektronické konference. Na ně není nutné cestovat. Vše se odehrává na Webu a prostřednictvím elektronické pošty (*real-time workshops*).

Několik elektronických dokumentových konferencí se již konalo. Následují příklady on-line konferencí z posledních let, které se týkaly chemie:

- ECCC'94: První elektronická konference počítačové chemie. Bližší informace můžeme nalézt na Web adrese:
<http://hackberry.chem.niu.edu/> .
- ECCC'95: Na rozdíl od ECCC'94 probíhala zcela na Webu. Zvláštní pozornost byla věnována vizuální reprezentaci chemických struktur. Diskuse na Webu probíhala za použití zvláštních doplňků Webu. Další informace viz Web adresa:
<http://hackberry.chem.niu.edu/ECCC2/> .
- ECCC'96, ECCC'97, ECTOC'97: Pokračování předchozích řad elektronických konferencí. Bližší informace na Web adresách:
 - ✓ <http://hackberry.chem.niu.edu/ECCC3/> ,
 - ✓ <http://hackberry.chem.niu.edu/ECCC4/> ,
 - ✓ <http://hackberry.chem.niu.edu/ECCC5/> ,
 - ✓ <http://www.ch.ic.ac.uk/ectoc/> .
- ECTOC'95: Elektronická konference o trendech v organické chemii. Konference má Web stránku na adrese:
<http://www.ch.ic.ac.uk/ectoc/> .
- ECHET'96: Šlo o elektronickou konferenci heterocyklické chemie za použití kombinace Webu a elektronické pošty. Blíže viz <http://www.ch.ic.ac.uk/ectoc/echet96/> .
- CHEMCONF'93: První on-line konference pro učitele chemie. Zúčastnilo se jí 450 učitelů chemie ze 33 zemí. Organizováno pomocí elektronické pošty.
- INCINC'94: Mezinárodní chemometrická konference. Využití Webu a elektronické pošty (pomocí LISTSERV bylo možné přihlásit se do diskuse v jedné nebo v několika sekcích).

Budoucnost slibuje značný růst tohoto typu konferencí, které budou využívat moderních technologií Internetu.

2.7 Vizualizace, modelování, simulace

Všechny tři oblasti jsou pro chemii důležité. Web umožňuje publikovat kvalitní obrázky, animace, video. Webových míst s krásnými a užitečnými obrázky z oblasti chemie je velmi mnoho. Významnou možností jsou třídimenzionální obrázky. Vytváříme je použitím zvláštního jazyka VRML (*Virtual Reality Modelling Language*). Podobně jako k HTML, i k VRML na Webu existuje celá řada příruček (můžeme zkusit některý z vyhledávacích nástrojů s klíčovými slovy *VRML & Guide*. Například Aereal Instant VRML Home World, který najdeme na Web adrese <http://www.aereal.com/instant/> nebo příručky <http://www.astronomy.ohiostate.edu/~stephens/vrml/> či http://search.netscape.com/eng/live3d/howto/vrml_primer_body.html .

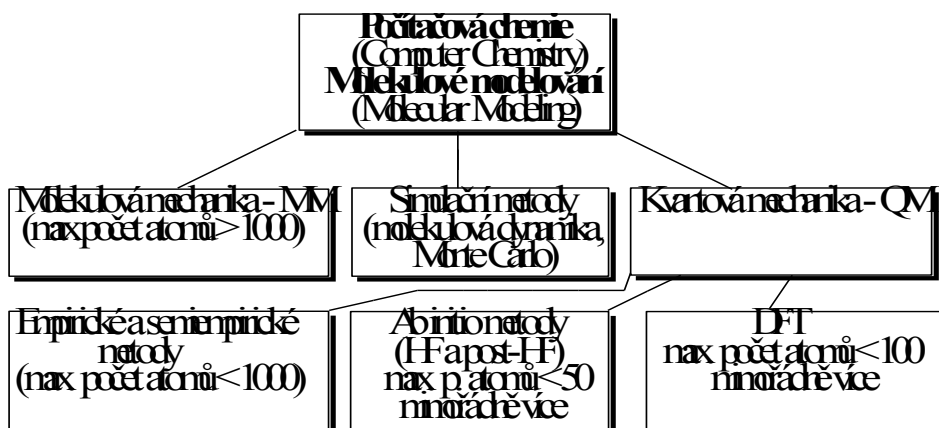
Ale zpět k pěkným obrázkům. Možnosti Webu (a VRML) můžeme vidět např. na adresách:

- <http://expasy.hcuge.ch/pub/Graphics/IMAGES/GIF> ,
- <http://scsg9.unige.ch/fln/eng/toc.html> ,
- <http://www.caos.kun.nl/wetche/organic/> ,
- <http://www.csc.fi/lul/chem/graphics.html> ,
- <http://www.imb-jena.de/IMAGE.html> ,
- <http://www.knowledgebydesign.com/tlmc/tlmc.html> .

Další zajímavé odkazy v souvislosti s chemickými strukturami jsou uvedeny v kapitole 2.16.

Mnoho obrázků můžeme získat (*download*). Řadu dalších tipů se dozvíme na meta stránkách. Dalším pro chemiky užitečným místem na Webu z pohledu vizualizace chemických struktur může být <http://www.chemaxon.com/marvin/> . Nalezneme zde řadu užitečných Java apletů pro kreslení a zobrazování chemických struktur na Webu. Je zde dobrá dokumentace i příklady použití apletů uvnitř HTML dokumentů nebo při použití jazyka JavaScript.

Je vhodné na tomto místě též zmínit stručný přehled metod počítačové chemie (schéma 1):



Specializovanou oblastí vizualizace, modelování a simulace je v chemii tzv. molekulární hyperaktivita. Molekulární hyperaktivitou rozumíme trojdimenzionální prezentaci molekul na Webu. Uživatel může molekuly analyzovat prostřednictvím mnoha hyperspojení. Zkoumají se geometrické tvary, potenciály, průběhy chemických reakcí. Jednou z možností přípravy materiálu pro molekulární hyperaktivitu jsou animované obrázky ve formátu MPEG. Jinou možností je kombinace jazyků HTML a VRML. HTML sám nestačí. Je určen k přípravě dvoudimenzionálních dokumentů („prezentace textem a obrázky“). Pomocí VRML vytvoříme trojdimenzionální scény složené z molekulových objektů. Jednotlivé objekty mohou dále být aktivovatelnými položkami. Takové základní reakce v organické chemii je možné vidět např. na webovské adrese:

<http://ourworld.compuserve.com/homepages/rehrler/>.

O VRML v chemii nás informuje také dokument na adrese:

<http://ws05.pc.chemie.th-darmstadt.de/vrml/>.

O tom, co lze s VRML dokázat, se můžeme přesvědčit na adrese <http://vrml.sgi.com/worlds/>.

Prostřednictvím Webu můžeme také navštívit centrum pro molekulární modelování na Web adrese <http://cmm.info.nih.gov/modelling/> či Molecular Simulations, Inc. na Web adrese <http://www.msi.com/viewer/>. Na internetové adrese <http://www.camsci.com/products.html> nalezneme nejlepší programy pro vizualizaci a modelování v chemii. Většina programů pro editaci a prohlížení molekul je ovšem velmi drahá a ceny jednotlivých programů se pohybují od desítek po stovky tisíc korun. Pro běžné používání a informaci o programech nám ovšem dostatečně postačí tzv. **free verze** těchto programů. Programy je možné z uvedených Web adres zdarma nahrát do vlastního počítače a používat.

Zde je jejich přehled na Internetu:

- **Babel** (<http://www.eyesopen.com/babel.html>) je pomocný program. Často se totiž stává, že soubor nesoucí chemickou strukturu, je třeba editovat či prohlížet. Avšak editor nebo prohlížeč struktur, který je k dispozici, formát souboru nezná. PC program Babel umožňuje vzájemnou konverzi různých formátů souborů, které se používají při kreslení nebo zkoumání chemických struktur. Často používaným je např. PDB formát.
- **Etc** (<http://etc.on.ca/>) proslulá kanadská firma s nejprodávanějším chemickým softwarem (nejen) pro střední školy. Obsahuje aktivní periodickou tabulku, trojrozměrný zobrazovač molekul a grafický editor strukturních vzorců. Nyní i některé výpočty geometrií molekul.
- **ChemDraw** (<http://www.camsoft.com>) je PC program nebo **plug-in** (doplňk k Web prohlížeči), který dovoluje zejména prohlížení chemických struktur získaných prostřednictvím databáze *ChemFinder* nebo i jiných databází na Webu. Jako plug-in je také volně dostupný trojrozměrný manipulátor molekul *Chem3D* umožňující např. rotaci molekul v rámci Web stránek.
- **ChemSketch** (<http://www.acdlabs.com>) je program pro snadnou a rychlou editaci chemických struktur. Podporuje výpočty chemických vzorců a chemických hmotností. Umožňuje kreslit chemické reakce, molekuly, schematické diagramy a vytvářet různé chemicky orientované

prezentace. Pracuje současně s chemickými strukturami, textem i grafikou. Umožňuje 2D a 3D rotace molekul a import obrázků z jiných aplikací. Podporuje grafické formáty TIFF, GIF, BMP a WMF. Do programu je vestavěna jistá chemická inteligence, kdy např. dokáže automaticky doplňovat některé chemické vazby. Podle <http://www.acdlabs.com> existuje více než 600 instalací tohoto programu v České republice.

- **ChemWeb** (<http://www.softshell.com/free/demos/getdemos.html>) je PC program pro kreslení chemických struktur v rámci přípravy Web stránek. Program ukládá nakreslené struktury jako GIF soubory, které jsou přímo použitelné k publikaci a distribuci 2D struktur pomocí Webu.
- **Chime** (<http://www.mdli.com>) je *plug-in* (doplněk k Web prohlížeči) sloužící k zobrazování chemických struktur z databázi a Web stránek, které produkuje společnost MDL Information Systems. Uvedené chemické struktury je tak možné zobrazovat v rámci Web stránek.
- **ISIS/Draw** (<http://www.mdli.com>) je velmi příjemný PC program pro 2D editaci chemických struktur. Poskytuje především velmi kvalitní grafické možnosti pro různé publikace. Slouží také jako editor dotazů v databázích ISIS a CrossFire. Podobně jako předchozí program je vybaven chemickou inteligencí.
- **Marvin** (<http://www.chemaxon.com/marvin/>) je *Java applet* s chemickou inteligencí užitečný pro editování a zobrazování chemických struktur na Web stránkách.
- **PCMolecule2** (<http://www.blc.arizona.edu/linus/linus.html>) je program k vizualizaci molekul v PDB formátu. Je vhodný pro studenty anebo učitele chemie, biochemie, biologie apod. Má také možnost ukládat soubory ve formátu GIF k použití na Web stránkách.
- **PovChem** (<http://www.chemicalgraphics.com/PovChem/>) je PC program ke zkoumání a

prohlížení molekul v PDB formátu.

- **Rasmol** (<http://www.umass.edu/microbio/rasmol/>) je 3D zobrazovač molekul. Jde o PC program sloužící ke zkoumání molekul ve 3D. Zaměřuje se zejména na rotace molekul a poskytuje kvalitní grafický výstup. Je vhodný k vizualizacím proteinů, kyselin a malých molekul.
- **Visualize** (<http://www.compbio.net/downloads/visualize/index.html>) je PC program sloužící k prohlížení molekul. Pracuje zejména s PDB formátem souborů. Volně k dispozici je také zdrojový program.
- **WebLabViewer** (<http://www.msi.com/download/>) je PC program poskytovaný zdarma na určitou zkušební dobu (tzv. *Trial verze*). Dovoluje zobrazovat i editovat chemické struktury, počítat geometrii molekul, analyzovat jejich strukturu, vytvářet Web stránky a další prezentace.

V chemických vizualizačních programech máme při vytváření modelů molekul snadnou práci. Tvorbu nám usnadňuje např. předem vytvořená tabulka funkčních skupin, ze které můžeme přímo vkládat k základním řetězcům molekul vybrané radikálové skupiny.

Následující tabulka 1 uvádí další přehled chemických programů, které je možné volně stáhnout. Jedná se o vybrané nekomerční programy, které jsou využitelné zejména v teoretické a obecné chemii.

Typickou vlastností tohoto software ovšem je, že nemívá grafické rozhraní. Tento nedostatek je dnes závažný. Proto je vhodné doplnit programy v tabulce o graficky orientovaný software umožňující vizualizaci.

Některé možnosti řešení uvádí tabulka 2 – můžeme vytvořit jádro vlastního výpočetního centra pro počítačovou chemii a modelování molekul a také si doplnit svůj programový potenciál o další užitečné programy. Uživatelským prostředím i možnostmi, které nabízejí, jsou vhodné pro odborníky.

Tab. 1 Přehled vybraných free verzí chemických programů

Název	URL	Distribuce	Charakteristika
Aimpac	http://www.chemistry.mcmaster.ca/faculty/bader/aim http://www.chemistry.mcmaster.ca/aimpac/	Zdrojový kód, download	Baderova teorie „Atomy v molekule“
AMMP	http://asterix.jci.tju.edu/amm.html	Verze 1.5 pro Win 3.x, Win 95	molekulová mechanika a dynamika, grafické rozhraní
DALTON	http://www.kjemi.uio.no/software/dalton/dalton.html	verze 1.+ pro Win 98/NT	ab initio výpočty SCF, MP2 nebo MCSCF
DeFT	ftp://ftp.CCL.net/pub/chemistry/software/SOURCES/FORTRAN/DEFT/	zdrojový kód	teorie hustotního funkcionálu
Gamess-UK	http://www.dl.ac.uk/CFS/cfs.html	verze 6 pro Win 9x/NT	ab initio, DFT, semiempirické metody (MNDO, AM1, PM3)
MOPAC	ftp://ftp.ccl.osc.edu/pub/chemistry/software/MS-DOS/mopac-for-dos/ ftp://ftp.CCL.net/pub/chemistry/software/MS-WIN95-NT/mopac6/	verze 6, 7 pro MS DOS verze 6 pro MS Win 9x/NT	pokročilé semiempirické metody
PC Gamess	http://classic.chem.msu.su/gran/gamess/index.html http://www.msg.ameslab.gov:80/gamess/gamess.html	verze 5.0 pro Win 9x/NT	ab initio
Tinker	http://dasher.wustl.edu/tinker/ resp. ftp://dasher.wustl.edu/pub/tinker-bin/intelpc/	verze 3.6 pro Win 95 a zdrojový kód	molekulová mechanika a dynamika

Tab. 2 Přehled vybraných doplňků k chemickým programům

Název	URL adresa	Poznámka	Operační systém
Babel	ftp://kekule.osc.edu/pub/chemistry/software/MS-WINDOWS95/babel/	Univerzální transformátor desítek molekulových formátů	MS DOS
Chemscape Chime	http://www.mdli.com/chemscape/chime	Chemický plug-in pro webovské prohlížeče	Win 3.x, Win95
GopenMol	http://laaksonen.csc.fi/gopenmol/gopenmol.html	Grafické rozhraní pro OpenMol, použitelný i pro Gaussian xx a jiné.	Win 3.x, Win95
Molda	http://cssj.chem.sci.hiroshima-u.ac.jp/ftp/molda/molda.htm	Modelování molekul, molekulová grafika, exporty a importy mnoha formátů, grafické rozhraní pro Gaussian, Amber, MM2	Win 3.x, Win95
Molmol	http://www.mol.biol.ethz.ch/wuthrich/software/molmol	Molekulově grafický program pro vizualizaci a analýzu 3D struktur biologických makromolekul	Win95/NT
Molden	http://www.caos.kun.nl/~schaft/molden/molden.html	Program pro vizualizaci výstupů Gamess-UK, US, Mopac/Ampac, Gaussian atd.	Win 9x/NT
MolPOV	http://www.chem.ufl.edu/~der/der_pov2.htm	Vizualizace struktur v PDB formátu	Win95
RasMol	ftp://ftp.dcs.ed.ac.uk/usr/local/share/ftp/root/ http://klaatu.oit.umass.edu/microbio/ras/mol/getras.htm#raswin	Prohlížeč struktur v PDB formátu	Win 3.x, Win95
Re-View	http://www.brunel.ac.uk:8080/depts/chem/ch241s/re_view/re_view.htm	Vizualizátor a analyzátor 3D-molekulových struktur	Win 3.x

Swiss-Pdb Viewer	http://www.expasy.ch/spdbv/	Vizualizátor a analyzátor 3D-molekulových struktur ve formátu PDB (i několika současně)	Win 9x/NT
WebLab Viewer (lite nebo 30 dní)	http://www.msi.com/weblab/viewer/info/	Vizualizátor a analyzátor 3D-molekulových struktur, rozsáhlé exporty a importy jiných molekulových grafických formátů	Win95/NT
ISIS Draw	http://www.mdli.com/download/idraw.html	Kreslicí program pro vytváření chemických struktur	Win 3.x, Win95/NT
Pro-3D	http://www.med.ufl.edu/Biochem/pchun/	Modelování, vizualizace a analýza 3D-molekulových struktur, akceptuje data z X-ray krystalografických a PDB dat	Win95
Povray	http://www.povray.org	Tvorba vysoce kvalitní grafiky	Win95

V těchto programech jsou velmi propracované nabídkové lišty. Nabízejí nejen pomůcku pro molekulové modelování v daném programu, ale také výbornou pomůcku učitelům k výuce.

Velmi populárními se začínají v poslední době stávat v akademických kruzích tzv. 3D simulátory pohybu molekul a také „prostorové“ 3D prohlížeče molekul. Zatím nejsou volně dostupné v síti Internet, ale dá se předpokládat, že v dohledné době je již v internetové síti najdeme. Tyto programy využívají prostředí virtuální reality. K plnohodnotnému prohlédnutí potřebujeme tedy speciální brýle s barevnými skly. Při použití elektronické rukavice si můžeme molekulu i „osahat“.

2.8 Chemické manuály

Na Webu se objevují manuály k různým programům (*on-line manuals*). Většinou jsou zpracovány v HTML jazyce, např. manuály k programům pro modelování Xmol a RasMol. Ukázky manuálů najdeme na webovských adresách: <http://staff.vscht.cz/guide/vybkap/finger.htm>, <http://www.cis.ohio-state.edu/~barr/INN.html>.

2.9 Chemické databáze

Obrovskými zdroji informací na Webu jsou databáze. V této souvislosti hovoříme o „webové“ podobě databází. Ty největší jsou placené – platí se buď za jednotlivé dotazy, měsíčně nebo celoročně. Zde je přehled několika placených databází:

- **Beilstein Information Systems (BIS)**, <http://www.beilstein.com/>,
- **Derwent**, <http://www.derwent.com> - patentové a vědecké informace,
- **Chemical Abstracts Service (CAS)**, <http://www.cas.org>,
- **ISI**, <http://www.isinet.com> - bibliografické, citační databáze pro přírodní, sociální a humanitní vědy, specializované chemické (reakční) databáze.

Pro chemické databáze poskytuje Web výborné možnosti – existuje celá řada volně přístupných databází. V databázích typu on-line

můžeme bezprostředně v různých webovských sídlech vyhledávat. K nejznámějším webovským databázím patří:

- <http://cisti.nrc.ca/cisti/> - řada volně přístupných databází pokrývající knihy, konferenční sborníky apod.,
- <http://euch6f.chem.memory.edu/> (ChemKey Search Database) – články z organické chemie (téměř 50 000 článků),
- <http://gripsdb.dimdi.com/engl/guieng.html> - výborná medicínská časopisová databáze MEDLINE,
- <http://herzberg.ca.sandia.gov/cgi-bin/carlbrowser.tcl> - organické sloučeniny podle molekulových vzorců,
- <http://chemfinder.camsoft.com/> (Chemfinder) – databáze chemických sloučenin, můžeme hledat podle molekulových vzorců, chemického jména, CAS identifikačního čísla, molekulové hmotnosti apod.,
- <http://chemsources.com/> - chemické výrobky (cca 200 000),
- <http://ChemWeb.com/> - chemické struktury, abstrakty, patenty (pěkně zpracovaný je zde např. přehled aminokyselin),
- <http://ndb-mirror-2.rutgers.edu/> - databáze nukleových kyselin,

- http://pharminfo.com/drugdb/db_mnu.html - léky,
- <http://plumbum.ceu.cz/ETD/Default.htm> - ekotoxikologická databáze,
- <http://qcldb.ims.ac.jp/index.html> - literatura z kvantové chemie,
- <http://schiele.organik.uni-erlangen.de/cactvs/index.html> (NCI Chemical Structural Database) - chemické struktury,
- <http://schiele.organik.uni-erlangen.de/services/webmol.html> (Web chemical Structures Database) - chemické struktury
- <http://uncweb.carl.org/> (Uncover) – články (cca 7 milionů) z více než 14 000 časopisů,
- <http://ull.chemistry.uakron.edu/erd/> (Hazardous Chemical Database) - nebezpečné chemikálie (přes 1 990),
- <http://webbook.nist.gov/chemistry> (NIST Chemistry Webbook) - databáze chemických organických a anorganických látek, vyhledávání podle předchozích kritérií, data o chemických a fyzikálních vlastnostech více jak 10 000 sloučenin,
- <http://www.ccdc.cam.ac.uk/> - chemické struktury a databáze,
- <http://www.colby.edu/chemistry/cmp/cmp.html> - organické sloučeniny,
- <http://www.coleparmer.com/CHEMCOMP/icrd2.htm> - databáze chemické rezistence,
- <http://www.emsl.pnl.gov:2080/proj/crdb/> - databáze výpočtů elektronických struktur,
- <http://www.ibc.wustl.edu/klotho/> - databáze proteinů,
- <http://www.chem.brown.edu/chem-ph.html> - články z chemické fyziky,
- <http://www.chem.com/> - chemikálie (cca 127 000),
- <http://www.chemie.fu-berlin.de/cgi-bin/abbscomp/> - zkratky chemických sloučenin (např. THF - tetrahydrofuran) a obecné chemické zkratky na podobné Web adrese, kde místo abbscomp uvedeme acronym (např. NMR – Nuclear Magnetic Resonance),
- <http://www.luc.ac.be/Research/TheoChem/Data/> - články z teoretické chemie,
- <http://www.pdb.bnl.gov/PDB> - proteinová databanka,
- <http://www.shef.ac.uk/chemistry/web-elements/> - vyhledávání prvků periodické soustavy prvků, existuje i česká verze <http://plumbum.ceu.cz/>.

Známymi databázovými středisky (*suppliers*), které poskytují přístup k databázím v on-line režimu jsou např.:

- Dialog, <http://www.dialog.com/>,
- FIZ Chemie, <http://www.fiz-chemie.de/>,
- Chemport, <http://www.chemport.org/>,
- LEXIS-NEXIS, <http://www.lexis.nexis.com/>,
- MEDLINE, <http://www.dimdi.de/homeeng.htm>,
- Questel·Orbit, <http://www.questelorbit.com/>,
- STN International, <http://info.cas.org/ONLINE/DBSS/>, <http://info.cas.org/stn.html>.

Na Webu existují meta stránky, které se zaměřují přímo na chemické databáze. Jde

o katalogy zdrojů hyperspojení na chemické databáze. Zde je několik příkladů:

- <http://fs.chemie.uni-wuerzburg.de/ak/internet/database.html>,
- <http://hobbes.chem.ualberta.ca/~scott/chemdb.html>,
- <http://library.adelaide.edu.au/guide/sci/Chemistry/databases.html>,
- http://www.chem.rpi.edu/icr/chemres/chemres_03.html,
- <http://www.lib.uea.ac.uk/libinfo/database/rsdbase.htm>,
- http://www.yahoo.com.au/Science/Chemistry/Molecular_Database/,
- <http://www3.hanyang.ac.kr/~chem/Link/database.html>,
- <http://www3.chemieserver.de/nat/chemie/uk-daten.html>.

Je možné zkusit různé vyhledávací nástroje s heslem chemistry & databases. Uvádí se že na Webu jsou jich v současnosti stovky, zaměřené na chemii. Nakladatelství Reed Elsevier (<http://reed-elsevier.com>) chystá na toto téma knihu „World databases in Chemistry“.

Chemické databáze obecně dělíme na bibliografické, chemických sloučenin, komerčních produktů, chemických reakcí, software a patentové. K jednotlivým kategoriím je uvedeno několik vybraných odkazů.

Volně přístupné bibliografické databáze

- Beilstein Abstracts, <http://chemweb.com/databases> - 600 000 článků z 140 organických chemických časopisů od r. 1980,
- CLS Online Journals, <http://library.caltech.edu/online/onlinejrn1.htm> - seznam časopisů dostupných on-line (plné texty, abstrakty nebo jen obsahy),
- Internet Grateful Med, <http://igm.nlm.nih.gov/> - 15 databází,
- PubMed, <http://www.ncbi.nlm.nih.gov/entrez/query.fcgi> - jiný vyhledávací systém v Medline a jiných databázích,
- QCLDB-Quantum Chemistry Literature DataBase, (46 000 záznamů), <http://qcldb.ims.ac.jp/index.html> - publikace o ab initio MO výpočtech,
- The Internet Directory of Publications, <http://www.publist.com> - databáze s informacemi o 150 000 tištěných i elektronických časopisech, magazínech, bulletiněch, monografiích, apod.,
- UnCoverWeb, <http://uncweb.carl.org/> - 8,8 milionů článků z 18 000 časopisů od r. 1988.

Volně přístupné databáze chemických sloučenin

- Acronym Database, <http://129.79.137.107/cfdocs/libchem/titleu.cfm> - chemické zkratky, 11 000 záznamů,
- ATSDR HazDat Database, <http://www.atsdr.cdc.gov/hazdat.html> - databáze nebezpečných látek,
- CODATA (Committee on Data for Science and Technology), <http://www.codata.org/> - termodynamické vlastnosti klíčových sloučenin, základní fyzikální konstanty,
- Engineering Chemistry DataBase, <http://159.226.63.177/> - anorganická termochemická data, oktanová čísla, polymery, ... ,
- Hazardous Substances Databank <http://chem.sis.nlm.nih.gov/hsdb/> - 4 500 nebezpečných látek, vyhledávání podle struktury,
- ChemFinder (CambridgeSoft), <http://www.chemfinder.com> - databáze chemických sloučenin, 75 000 záznamů, základní vlastnosti, odkazy na ostatní databáze,
- ChemID, <http://igm.nlm.nih.gov/> - databáze chemikálií regulovaných nebo významných pro biomedicínu, 340 000 záznamů,
- Chemistry WebBook, <http://webbook.nist.gov/chemistry/> - 31 000 sloučenin, termochemická data, spektra, ... ,
- MSDS (Cornell University), <http://msds.pdc.cornell.edu/issearch/msdssrch.html> , 325 000 záznamů "Material Safety Data Sheets",
- NCI 3D, <http://nci3d.chemweb.com:8012/nci3d/> - databáze a prezentace 3D struktur sloučenin, 127 000 záznamů.
- Organic Compounds Database, <http://www.colby.edu/chemistry/cmp/cmp.html> - 5 000 sloučenin, fyzikálně chemická data,
- PhysProp, <http://gpengineeringsoft.com/> - databáze 6 500 sloučenin s fyzikálně chemickými vlastnostmi, program pro odhad vlastností neznámých sloučenin (shareware),
- The RSCB Protein Data Bank, <http://www.rcsb.org/pdb/> - 11 000 3D struktur makromolekul (proteiny, nukleové kyseliny, ...),
- Toxnet (Toxicology Data Network), <http://sis.nlm.nih.gov/sis1/> - toxikologické databáze, databáze nebezpečných látek,
- Vermont SIRI MSDS, <http://hazard.com/msds/index.html> , databáze výrobců chemikálií, kteří mají MSDS pro hledanou sloučeninu, další užitečné informace o chemikáliích,
- Virtual Material and Process Simulation Center, <http://pirika.com/chem/index-j.html> - výpočty fyzikálně chemických vlastností sloučenin on-line,
- WebElements, <http://www.webelements.com> - periodická tabulka prvků s jejich vlastnostmi,
- WebMolecules, <http://www.webmolecules.com/index.shtml> - 3D struktury 50 000 sloučenin.

Volně přístupné databáze komerčních produktů

- ChemAcx (CambridgeSoft), <http://www.chemacx.com> - databáze chemikálií pro výzkum s možností on-line nákupu (> 210 dodavatelů),
- Chemyclopedia Online, <http://pubs.acs.org/chemcy/> - databáze komerčně dostupných chemikálií s informacemi o dodavatelích,
- Chemical Reagents and Samples, <http://www.unibas.ch/mdpi/forum.htm#chemicals> - seznam serverů umožňujících vyhledávání chemikálií,
- LabX, <http://www.labx.com/> - burza vědeckých přístrojů,
- SciQuest, <http://www.sciquest.com> - databáze komerčně dostupných produktů pro vědecké účely (chemikálie, přístroje, ...), 250 000 záznamů, s možností on-line nákupu,

- Sigma-Aldrich, <http://www.sigma-aldrich.com/> - on-line katalog největšího dodavatele chemikálií pro výzkum, prohledávatelný podle substruktury.

Volně přístupné databáze chemických reakcí

- ISI Chemistry Server Trial, <http://www.isinet.com/ics/index.html> - zkušební provoz poskytující přístup k datům z jednoho roku (1998, 46 000 reakcí),
- ISI Reaction Citation Index preview, <http://chemweb.com/databases/rci/html/welcome.htm> - zkušební provoz,
- WebReactions, <http://webreactions.net> - unikátní webový vyhledávací systém pro chemické reakce, založený reakčních typech a změně vazeb při reakci (obvykle se hledají substruktury). Použitelný pouze s Netscape Navigátorem 4.0 a výše (Java 1.1). 400 000 reakcí (zdarma patrně jen dočasně),

Volně přístupné databáze software

- CCL Software Archive, <http://www.ccl.net/chemistry/resources/software/index.shtml> - archiv programů, pro výpočtovou chemii při diskusní skupině „Computational Chemistry List“, desítky programů pro řadu operačních systémů,
- Chemistry Software and Information Resources (CSIR), <http://www.csir.org/> - vyhledávání software, informací v chemických diskuzních skupinách,
- NHSE: National HPPC Software Exchange, <http://www.nhse.org/index.html> - software, dokumentace, informace pro „High Performance and Parallel Computing“,
- Software Reviews (CTI), <http://www.liv.ac.uk/ctichem/swrev.html> - hodnocení software používaného při výuce chemie.

Volně přístupné patentové databáze

- esp@cenet, <http://ep.espacenet.com/> - evropská síť patentových databází (v původním jazyce), celosvětová databáze s 30 milióny dokumenty (anglické abstrakty),
- IBM Intellectual Property Network, <http://www.patents.ibm.com/> - 4 miliony patentů a patentových přihlášek, USA od r. 1971, World Intellectual Property Organization (WIPO) od 1997, European Patent Office (EPO) od r. 1979,
- Japanese Patent Office, http://www.ipdl.jpo-miti.go.jp/homepg_e.ipdl - vyhledávání japonských patentů (anglické abstrakty),
- Patent Information User Group (PIUG), <http://www.piug.org/select.html> - seznam důležitých patentových serverů,
- QPAT-US, <http://www.qpat.com/> - zdarma abstrakty USA patentů od r. 1974,
- US Patent and Trademark Office (USPTO), <http://www.uspto.gov/patft/> - databáze plných textů USA patentů od r. 1976.

2.10 Virtuální chemické knihovny (Virtual Libraries)

Jedná se vlastně o systém vzájemně

propojených webovských dokumentů.

Přehled vybraných virtuálních knihoven je uveden v tabulce 3.

Tab. 3 Přehled vybraných virtuálních knihoven

Obsah knihovny	Web adresa
Biomolekuly	http://golgi.harvard.edu/sequences.html
Biotechnologie	http://golgi.harvard.edu/biopages.html
Krystalografie	http://www.unige.ch/crystal/w3vlc/
Penicilin	http://www.ch.ic.ac.uk/e-chemlib/
Vše o chemii	http://proton.is.s.u-tokyo.ac.jp/~nishida/chemistry.html
Výběr z chemie	http://www.che.ufl.edu/WWW-CHE/outline.html

Univerzální informace v sobě zahrnuje např. virtuální chemická knihovna na Web adrese <http://www.chem.ucla.edu/chempointers.html>.

Co se týče konvenčních knihoven, poskytují prostřednictvím Webu řadu služeb. Pro ilustraci můžeme zkusit např. známé české knihovny:

- <http://lib-c.vscht.cz> ,
- <http://natur.cuni.cz> ,
- <http://tin.upol.cz> ,
- <http://www.flfi.cvut.cz/en/index.html> ,
- <http://www.knihovna.vsb.cz> ,
- <http://www.lib.cas.cz> ,
- <http://www.mzk.cz> ,
- <http://www.nkp.cz> ,
- <http://www.stk.cz> ,
- <http://www.uochb.cas.cz> ,
- <http://www.upce.cz> ,
- <http://www.zlin.vutbr.cz> ,
- <telnet://anezka.vc.cvut.cz> a mnohé další.

2.11 HTML pro chemiky

Ve světě Internetu existuje pokus zavést jazyk na bázi řídicích posloupností nebo povelů (tzn. *skriptový jazyk*) podobný HTML a reflektující potřeby chemiků. Nazývá se **CML** – *Chemical Markup Language* a bude určen přímo ke správě chemických informací. Někdy se mu také zjednodušeně říká „HTML s molekulami“ (*HTML with Molecules*). Podrobnosti o jazyce CML můžeme nalézt na adrese <http://www.xml-cml.org> . Brzy se také setkáme se speciálním Web prohlížečem určeným chemikům se jménem **JUMBO** (podrobnosti na Web adrese: <http://www.xml-cml.org/jumbo/>).

2.12 Chemici hledají zaměstnání

Existuje řada Webovských sídel, která jsou zaměřena na informace o pracovních příležitostech

- <http://camsoft.com/store/> - WWW katalog chemicky orientovaných softwarových produktů, počítačů a knih,
- <http://www.almara.cz/mlchemica/> - elektronický obchod s chemikáliemi v ČR,
- <http://www.e-chemicals.com/excite/> - pouze prodej chemikálií,
- <http://www.chemos-group.com/> - elektronický obchod s chemikáliemi v ČR,
- <http://www.chemsw.com> - informace, stručný popis a ceny veškerého chemicky orientovaného software pro Windows, vydává časopis *ChemSW* (zdarma),
- <http://www.1cm.com/> - více kategorií nabízeného zboží než jen chemikálie,
- http://www.links2go.com/topic/Chemistry_Software - vyhledávání v oblasti chemického softwaru,
- <http://www.proxim-pu.cz/> - elektronický obchod s chemikáliemi v ČR,
- <http://www.scitech.cz/software.htm> - informace, stručný popis a ceny veškerého chemicky orientovaného software pro Windows i Unix.

Velký význam má Internet i pro chemický průmysl, průzkum chemického trhu, přehled, nabídku a prodej chemikálií, přístrojů a pomůcek.

2.14 Chemikálie

Informace na WWW rozdělujeme

pro chemiky. Bohužel vesměs všechny jsou v zahraničí. Nejširšími českými databázemi pracovních příležitostí jsou *Najdi.To* (<http://www.najdi.to.cz>) a *Volná místa* (<http://www.volna.mista.cz>) . Samozřejmě můžeme hledat také v různých vyhledávačích, např. Seznamu či Atlasu. V zahraničí najdeme např. tyto Web adresy s nabídkou volných pracovních míst pro chemiky:

- <http://ellington.pharm.arizona.edu/~bear/index.html#job> ,
- <http://hackberry.chem.niu.edu:70/1/ChemJob/> ,
- <http://chemweb.com/jobs/> ,
- <http://www.abg.asso.fr/> ,
- <http://www.ks.uiuc.edu/~sergei/jobs/> a mnohé další.

2.13 Chemický obchod

Tady v zásadě rozlišujeme dvě kategorie:

- a) obchodní informace
- b) elektronický obchod.

Chemický obchod (a obecně internetový obchod) je hudba budoucnosti. Ovšem již dnes mnoho lidí využívá nákupy prostřednictvím Internetu a předpokládá se, že během několika let bude internetový obchod dominantním způsobem nákupu. Kdo by se unavoval navštěvováním obchodů, když stačí napsat slovo ve vyhledávači, pak už jen vyplnit objednávací formulář a zboží za pár dní přijde až domů. Jako příklady elektronického chemického obchodu mohou sloužit např. stránky:

do několika skupin:

- a) všeobecné informace
- b) obchodní informace
- c) oborové chemikálie
- d) informace o bezpečnosti
- e) recyklace a recyklovatelnost
- f) ceny chemikálií.

Všeobecné informace.

Předmětem činností informačních zdrojů Webu této kategorie je poskytovat všeobecné informace o chemikáliích. Tato místa lze volně prohledávat podle různých klíčových slov, např. podle názvu chemikálie, jejího CAS čísla apod. Patří mezi ně zejména:

- <http://www.chem.com/> - obsahuje 127 000 struktur chemikálií, před prohledáváním danou strukturu načtneme,
- <http://www.chemcenter.org/> - jde o související informace a dokumenty na vědecké bázi poskytované chemickým centrem Americké chemické společnosti,
- <http://www.chemexper.be/> - zde lze vyhledávat chemikálie podle různých kritérií, je možné přidat i vlastní chemikálie.

Obchodní informace.

Předmětem činnosti informačních zdrojů Webu této kategorie je poskytování informací obchodního charakteru. Jde zejména o zprávy, analýzy, lokalizace výrobce či distributora, obchodní katalogy apod. Jsou to zejména:

- <http://pubs.acs.org/chemcy/> - Chemyclopedia Online je místo zaměřené na obchodní informace o laboratorních chemikáliích a dalším vybavení laboratoří,
- <http://www.buyersguidechem.de/> - zde lze získat adresář dodavatelů dané chemikálií a dalších chemických výrobků (přes 50 000),
- <http://www.che.ufl.edu/WWW-CHE/topics/chemicals.html> - obsahuje seznam odkazů na chemické výrobce a dodavatele.
- <http://www.chemexpo.com/> - slouží jako lokátor výrobce nebo distributora, který prodává specifikovanou chemikálii,
- <http://www.chemicalonline.com/> - místo pro profesionály v chemickém průmyslu, kde lze vyhledávat nejrůznější obchodní informace (po bezplatné registraci),
- <http://www.chemsources.com/> - cílem tohoto místa je bezprostředně odpovídat na řadu chemických potřeb. Prohledávání je volné, avšak např. informace o dodavatelích jsou placené,
- <http://www.chemweek.com/> - obsahuje on-line prodejní katalog. Je nutná bezplatná registrace,
- <http://www.sourcerer.co.uk/asp/english/onlineen.asp> - obsahuje všechny chemikálie vyráběné v Anglii včetně jejich výrobců a další informace,

Oborové chemikálie.

Některá místa jsou oborově založená a díky svému zúžení i informačně poměrně bohatá a cílená. To se týká zejména specifických informací náležejících danému oboru. Patří sem např. následující místa:

- <http://www.petropages.com/> - obsahuje on-line prodejní katalog pro oblast petrochemie,
- <http://www.plasticsnews.com/> - se zaměřuje na plastické materiály různých kategorií.

Elektronická obchodní místa.

Jde o elektronické obchody s chemikáliemi, pro které platí obdobná pravidla „nakupování“ jako v běžném elektronickém obchodě (viz kapitola 2.13).

Elektronická kontaktní místa.

Zaměřují se na propojování výrobců, distributorů a uživatelů a obchodní výměnu chemických látek. Zpravidla se zde soustřeďuje aktuální nabídka chemických látek a poptávka po chemických látkách. Mezi taková kontaktní místa patří zejména:

- <http://www.allchem.com/> - obsahuje seznamy poptávaných a nabízených chemikálií, důraz je kladen na globální obchodní výměnu,
- <http://www.chemconnect.com/> - se zaměřuje na propojování výrobců a uživatelů chemikálií,
- <http://www.chemnet.com/> - se zaměřuje na spojení výrobců, distributorů a uživatelů z oblasti chemie a farmacie,
- <http://www.neis.com/> - obsahuje aktuální nabídku (ChemSell.com, sales.chemacx.com/chemarket/listsell.cfm) a aktuální poptávku (ChemQuote.com, sales.chemacx.com/chemarket/listquotes.cfm) po chemikáliích, lze registrovat i vlastní nabídku či poptávku.

Informace o bezpečnosti.

Na těchto místech se soustřeďují informace o vlivu chemických látek na životní prostředí, údaje

o bezpečnosti chemických látek, vlivu na zdraví lidí apod. Patří sem zejména následující místa:

- <http://dino.wiz.uni-kassel.de/dain/index.html> - obsahuje metadatabázi (databázi databází) zdrojů Internetu pro „environmental chemicals“ (ekologie chemikálií),
- <http://toxnet.nlm.nih.gov/> - obsahuje volně přístupný systém toxikologických databází o nebezpečnosti chemikálií,
- <http://www.1001Chemicals.com/> - je informativní příručka, která pokrývá široký rozsah chemikálií v domácích výrobcích,
- <http://www.epa.gov/> - Environmental Protection Agency obsahuje informace typu „co s chemikáliemi“,
- <http://www.chemie.fu-berlin.de/chemistry/safety/chemsafety.html> - obsahuje údaje o bezpečnosti chemikálií z oblasti chemie a farmacie.

Recyklace a recyklovatelnost.

Jde o místa zaměřená na likvidaci chemických látek, postupy jejich recyklování či recyklovatelnost. Patří sem např.:

- <http://www.recycle.net/recycle/> - obsahuje informace zaměřené na recyklovatelné komodity,
- <http://www.sonic.net/chemsearch/> - se zaměřuje na seznamy recyklovaných a recyklovatelných chemikálií.

Ceny chemikálií.

Cena bývá věcí vzájemné dohody mezi dodavatelem a odběratelem a zpravidla se nezveřejňuje. Její výše závisí na mnoha faktorech. Jsou však ceny, které jsou veřejné. Jsou to např. ceny chemikálií na komoditních burzách. Na Webu zřejmě není tolik míst, kde lze takové ceny získat. Příkladem mohou být tato místa:

- <http://www.camsoft.com/> - zde je možné získat např. aktuální nabídku i ceny chemikálií. Aktivujeme-li odkaz ChemACX.com, dostaneme se na stránku, ze které lze lokalizovat dodavatele. Do rámečku napíšeme název chemikálie, jejíž cena nás zajímá. Odpovědí bude jeden nebo více potenciálních dodavatelů této chemikálie. Aktivujeme-li některého z nich, zjistíme bližší údaje o nabízeném kontraktu. Mezi údaji je i jedna nebo více (podle odebíraného množství) cenových nabídek,
- <http://www.reedchemicals.com/rcpdem/ecn.asp> - pokud se staneme odběrateli European Chemical News, získáme přístup na uvedené místo. Jsou tam informace o posledních evropských kontraktech a cenách pro nejrůznější sloučeniny.

2.15 Usenet News pro chemiky

Několik zajímavých „newsgroups“ s chemickými tématy můžeme nalézt na Web adresách:

- http://www.chem.ucla.edu/chem_news.html ,
- http://www.rpi.edu/dept/chem/cheminfo/chemres/chemres_05.html ,
- <http://www.yahoo.com/Science/Chemistry/Usenet/> .

Pokud hledáme více, zkusíme zpravidla nejdříve vyhledávací nástroje. Z tohoto pohledu je zajímavý dokument na Web adrese:

http://www.chemie.fu-berlin.de/chemistry/index_en.html ,
kde kromě detailního rozdělení chemie na jednotlivá témata včetně jejich náplně, najdeme i mnoho různých zdrojů Webu.

2.16 Další zajímavé chemické adresy

Dále uvedené Web adresy odkazují na více oborů chemie současně a nebylo možné je zařadit do některé z předchozích konkrétních kapitol. Velmi zajímavé jsou např. odkazy na digitalizované videozáznamy prostorových modelů molekul.

- <http://acad.tnstate.edu/~chemnet/chem.html> - chemie a chemické zdroje na Internetu,
- http://dir.yahoo.com/Science/Chemistry/Computational_Chemistry/ - informace a zdroje z oblasti počítačové chemie,
- <http://hackberry.chem.niu.edu/> - převážně biochemické informace,
- <http://infoseek.go.com/Titles?qt=computational+chemistry> - informace a zdroje z oblasti počítačové chemie,
- <http://server.cll.net/chemistry.html> - počítačová chemie a její využití,
- <http://www.altavista.com/cgi-bin/query?q=computational+chemistry&pg=q&what=web&fmt>

- informace a zdroje z oblasti počítačové chemie,
- <http://www.compuchem.com> - software pro chemiky, chemické vzdělávání, strukturní modelování, počítačová chemie,
- <http://www.chemcenter.org/> - servis Americké Chemické společnosti,
- <http://www.cherwell.com> - software pro NMR simulaci,
- <http://www.isinet.com> - Institut pro vědecké informace,
- <http://www.lycos.com/cgi-bin/pursuit?query=computational+chemistry&cat=dir> - informace a zdroje z oblasti počítačové chemie,
- <http://www.msi.com> - software pro Unix, WebLab Viewer pro Win95,
- <http://www.netsci.org/Resources/Software/top.html> - přehledný a aktuální Index chemických zdrojů informací, software, komerčních a akademických institucí,
- <http://www.opencae.cz/> - česká hardwarová i softwarová chemická společnost,
- <http://www.scivision.com> - práce s proteiny, databáze polymerů a mnoho dalšího,
- <http://www.sgi.com/chembio/resources/> - rejstřík zdrojů chemických informací,
- <http://www.shef.ac.uk/chemistry/chemdex/welcome.html> - přehledný a aktuální Index chemických zdrojů informací, komerčních a akademických institucí.

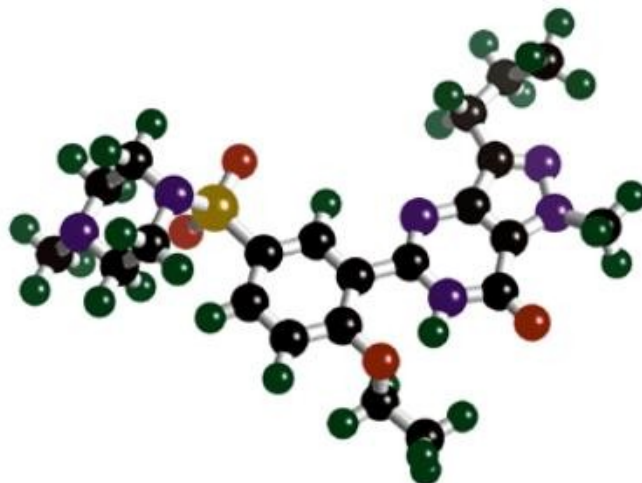
Následující odkazy jsou zaměřeny na reakční mechanismy (adice, eliminace, substituce, přesmyk, reakce organokovových sloučenin).

- <http://userwst1.fhreitlingen.de/~komma/reamech.htm#Elektoad> (reakční mechanismy adice, substituce apod.),
- <http://www.chem.msu.edu/~reusch/OrgPage/reactions.htm> ,
- <http://www.chem.ox.ac.uk/icl/dermot/mechanism1/> ,
- <http://www.ilpi.com/organomet/index.html> (stránka věnovaná převážně organokovovým sloučeninám),
- <http://www.schulchemie.de/framesrm.htm> .

Následují odkazy na stránky, kde jsou v různých formátech vyobrazeny modely molekul. Modely jsou ve formátech gif, jpg, jsou zde 3D modely, modely ve formátu VRLM a jsou zde i digitalizované videozáznamy prostorových modelů molekul v mpg.

- <http://ourworld.compuserve.com/homepages/JDebord/models.htm> (modely molekul v souborech komprimovaných programem WinZip),
- <http://sbchem.sunysb.edu/msl/fullerene.html> (modely různých sloučenin, převážně fullerenu),
- <http://shachi.cochem2.tutkie.tut.ac.jp/Fuller/Fuller.html> (modely různých látek),
- <http://www.anachem.umu.se/cgi-bin/pointer.exe?Graphics> (stránka plná odkazů na chemické struktury),
- http://www.chem.ox.ac.uk/icl/heyes/structure_of_solids/Strucsol.html - chemické struktury mnoha pevných látek, například Viagry (viz obrázek 1),
- <http://www.molecules.com/vrmlmols/> (používá VRML, velké množství 3D molekul rozdělených do kategorií).

Obr. 1 3D prezentace modelu Viagry



2.17 Výuka chemie

Mnoho námětů o roli Webu při výuce chemie nalezneme na meta stránkách nebo použitím vyhledávacích nástrojů s textem např. **Chemistry&Education**.

Příklad chemických učebních textů můžeme nalézt např. také na adrese:
http://naio.kcc.hawaii.edu/chemistry/redox_title.html.

Multimediální výuce chemie se věnuje velká pozornost. Svědčí o tom množství projektů na toto téma. Web se používá buď jako součást vyučování chemie (jsou na něm např. návody ke studentským laboratorním cvičením) nebo

vyučování probíhá plně v jeho rámci (viz např. GlobeWide Network Academy na adrese:
<http://uu-anna.mit.edu:8001/uu-gna/index.html>).

Pokud výuka probíhá plně v rámci Webu, hovoříme o „virtuální škole“. Příkladem virtuální školy může být „Virtual School of Natural Sciences“ a její kurs Principy proteinových struktur (viz adresa
<http://www.cryst.bbk.ac.uk/PPS/index.html>).

V každém případě však chemické fakulty a katedry používají Web ke své prezentaci a ke zveřejnění svých výsledků (viz ukázka WWW stránek katedry chemie Pedagogické fakulty Masarykovy univerzity v Brně – obrázek 2).

Obr. 2 Úvodní WWW stránka katedry chemie Pedagogické fakulty MU v Brně



Základem pro vyučování chemie je bezsporně **periodická tabulka prvků**. Proto je uvedeno několik odkazů na Web stránky, na kterých lze najít graficky vyobrazené periodické tabulky (popř. indexy), kde jednotlivé prvky slouží jako odkazy a po kliknutí na daný prvek se objeví jeho podrobná charakteristika:

- <http://apamac.ch.adfa.oz.au/OzChemNet/web-elements/> ,
- <http://bvsd.k12.co.us/schools/BHS/science/elements/> ,
- <http://bvsd.k12.co.us/~stanglt/per.html> ,
- <http://faraday.physics.utoronto.ca/Periodic/periodic.html> ,
- <http://gauss.euv-frankfurt-o.de/~chemie/pse/pse.html> ,
- <http://chemlab.pc.maricopa.edu/periodic/periodic.html> ,
- <http://klbproductions.com/yogi/periodic/> ,
- <http://pearl1.lanl.gov/periodic/> ,
- <http://plumbum.ceu.cz/PT/Default.htm> ,
- <http://tqd.advanced.org/2690/ptable/ptable.html> ,
- <http://visual.lbc.cz/studie/studie.asp?Id=34&Sort=Hitparada> (volně stažitelné),
- http://w3.nai.net/~bobsalsa/internet_periodic_table.htm ,
- <http://www.cegep-st-laurent.qc.ca/depar/chimie/table.htm> ,
- <http://www.csrr.iit.edu/periodic-table.html> ,
- <http://www.cyberchem.utm.my/am1/periodic/> ,
- <http://www.forst.uni-muenchen.de/~refo/ais/scio/elemetim.html> ,
- <http://www.chemicalelements.com/> ,
- <http://www.mcs.net/~ars/spectro/elements.htm> ,
- <http://www.micronmetals.com/ste.htm> ,
- http://www.oxychem.com/html/periodic_table.html ,
- <http://www.piskac.cz/Pavel/PT/> - program pro výuku chemie, databáze prvků,
- <http://www.shef.ac.uk/chemistry/web-elements/main/index-nofr.html> ,
- <http://www.speclab.com/elements/> ,
- <http://www.tabulka.cz/> ,
- <http://www.tech.mit.edu/Chemicool/elements/> ,
- <http://www.universe.digex.net/~kkhan/periodic.html> .

Tento oddíl obsahuje odkazy na stránky věnované převážně **chemickým pokusům** chemickým motivačním experimentům. Tyto stránky obsahují návody na provedení, pomůcky, chemikálie, vlastní postup, videoprojekci apod.:

- <http://198.110.10.57/Chem/Chem1Docs/Index.html> ,
- <http://cator.hsc.edu/~kmd/caveman/> (od jeskynního muže k chemikovi; pokusy, které se mu tenkrát hodily - výroba papíru, hliněného nádobí atd.),
- <http://genchem.chem.wisc.edu/labdocs/glossary/glossary.htm> (definice chemických pojmů),
- <http://genchem.chem.wisc.edu/labdocs/mainmenu.htm> (pokusy v laboratoři + video),
- <http://hera.vsp.cz/~pskopet1/chemie1.htm> - návody k chemickým pokusům,
- <http://library.advanced.org/3310/higraphics/index.html> ,
- <http://members.tripod.com/~Seilnacht/Saeurele.htm> ,
- <http://neon.chem.ox.ac.uk/vrchemistry/> (virtuální chemie),
- <http://omicron.felk.cvut.cz/cgi-bin/charset/~bobr/> (prakticko-metodický pomocník při vyučování informačních technologií ve škole i doma),
- <http://orac.sunderland.ac.uk/~hs0dad/student.htm> (testy pro studenty chemie, farmacie apod.),
- http://orac.sunderland.ac.uk/~hs0bcl/gloss_mas.htm (definice chemických pojmů),
- <http://scifun.chem.wisc.edu/HOMEEXPTS/HOMEEXPTS.html> (pokusy, které je možné udělat doma),
- <http://tqd.advanced.org/2690/> ,
- <http://turing.upjs.sk/~ganajova/HTML/PROJEKT.HTM> (stránka určená hlavně učitelům chemie základních a středních škol studentům - budoucím učitelům chemie).
- <http://ull.chemistry.uakron.edu/classroom.html> (průvodce chemií),
- <http://vax1.bemidji.msus.edu/~chemistry/glossary.html> (definice chemických pojmů),
- <http://www.bcpl.lib.md.us/~kdrews/chempage.html> (stránka je jakousi učebnicí chemie),
- <http://www.dartmouth.edu/academia/chem/chemexp/> ,
- <http://www.knowledgebydesign.com/tlmc/tlmc.html> (stránka s odkazy na grafiku, technologii, která se dá uplatnit při výuce chemie na Internetu),
- <http://www.lapeer.lib.mi.us/ChemCom/Index.html> ,

- <http://www.muweb.cz/www/Ipecenka> (Faraonovi hadi),
- <http://www.phs.uiuc.edu/~pearman/101Online/notes.html> (internetová učebnice chemie),
- <http://www.scuolaitalia.com/eureka/chimica/index.html> (stránka se spoustou dalších odkazů, chemické pokusy, databáze (italsky),
- <http://www.scuolaitalia.com/eureka/chimica/lab/index.html> ,
- <http://www.spomocnik.cz/> (server určený stávajícím i budoucím učitelům),
- http://www.uic.edu/~magyar/Lab_Help/lghome.html ,
- <http://www.umsl.edu/~orglab/> ,
- <http://www.volny.cz/rgaura/chemie.html> - návody k laboratorní přípravě sloučenin, zejména anorganických,
- http://www.wco.com/~ejia/EDU/chemist.htm#*INORGANIC* (nejlepší stránka s odkazy).

Zajímavé školní pokusy, informace o drogách a výbušninách a nejrůznější podněty k vyučovací metodám a náplním hodin najdeme na adrese <http://punknet.cz/chemie/index.php3> .

O dalších zajímavostech už jen ve stručnosti (všechny následující odkazy jsou české):

- <http://detonator.homepage.com/Home1.htm> - chemická pyrotechnika,
- <http://nobelprizes.com/nobel/chemistry/chemistry.html> – přehled Nobelových cen za chemii,
- <http://web.telecom.cz/scitech/software.htm> - nabídka produktů největších softwarových chemických firem s přímou možností objednávek,
- <http://www.ceskaskola.cz/> (stránky českého školství),
- <http://www.geocities.com/ResearchTriangle/Lab/3003> - výběr chemie (doporučeno),
- <http://www.chemistry.cz> - chemické zajímavosti,
- <http://www.jergym.hiedu.cz/~canoom> – stránka kabinetu chemie a biologie na gymnáziu,
- <http://www.muweb.cz/www/nobelchemie> - přehled Nobelových cen za chemii,
- <http://www.skoly.cz/> (české školy na Internetu),
- <http://www.upce.cz/~slchpl/chemie.htm> - mnoho odkazů na chemické WWW stránky.

3. Závěr

Internet je v současné době obrovským fenoménem a zcela zaplavil celý svět. Nevyhnul se mu samozřejmě ani svět chemie a výuky chemie.

A tak není divu, že si dnes už žádný chemik ani učitel chemie nedokáže bez Internetu a jeho vymožeností svůj život vůbec představit.

4. Literatura

- [1] Bachrach, S. M.:
The Internet. A Guide for Chemists. American Chemical Society, 1996.
- [2] Klán K., Mindl J., Štědrý A., Rubešová E.:
Chemická informatika. Úvod do používání Internetu. Ústav informatiky Akademie věd ČR, Praha 1999.
- [3] Šilhánek J.:
Úvod do chemické informatiky. Ediční a audiovizuální centrum VŠCHT, Praha 1994.
- [4] Jančář L., Lukáš I.:
Chemický občasník, Vol. 7, 76-105, Paido, Brno, 2000.