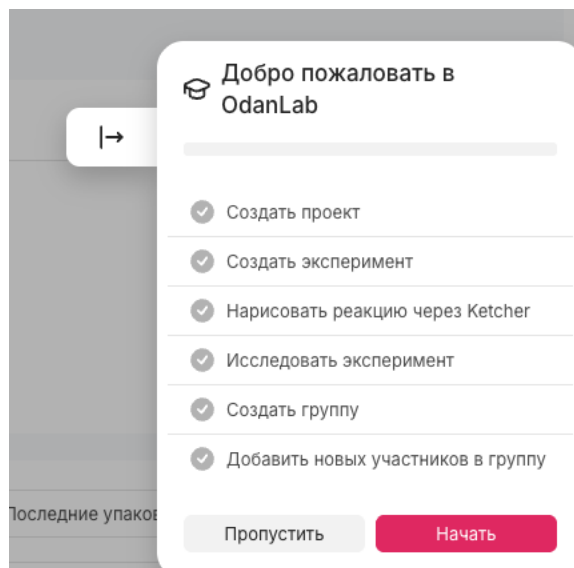


Информация, необходимая для эксплуатации заявляемого программного обеспечения (Руководство пользователя)

После логина в систему необходимо пройти обучение. Для этого нажмите кнопку Начать.



1. Создайте проект.

Роль: Зав. лаб. Создано: 10.04.2026 Последнее изменение: 10.04.2026

Проекты

Проекты ещё не добавлены

+ Добавить проект

Инвентарь

5 последних запросов

Последние запросы

Последние упаковки

Запросы ещё не добавлены

+ Добавить поиск

Добро пожаловать в OdanLab

Создать проект

My First Project

Status: Active

Project Manager: Fedor Kluev

Reactions: 123

2

21.12.2025

Используйте проекты для создания и организации экспериментов. Вид группы показывает все проекты, их статус, менеджера и дату создания.

✓ Создать эксперимент

✓ Нарисовать реакцию через Ketcher

✓ Исследовать эксперимент

✓ Создать группу

Пропустить

Создайте эксперимент.

Эксперименты

В проекте пока нет реакций

Создайте первую реакцию, чтобы начать работу с проектом

Создать реакцию

Главная страница

Проекты

Инвентарь

Telegram

Электронная почта

Политика конфиденциальности

Условия использования

support@odanchem.org

© 2026 Команда OdanLab

Добро пожаловать в OdanLab

Создать проект

Создать эксперимент

Имя	Видео	Тематика	Статус
EXP-1		101	Актив
EXP-2		102	Актив
EXP-3		103	Актив
EXP-4		104	Актив
EXP-5		105	Актив
EXP-6		106	Актив

Эксперименты — это записи, в которых вы можете хранить свои реакции. После создания вы также можете искать их с помощью фильтров.

Нарисовать реакцию через Ketcher

Исследовать эксперимент

Создать группу

Пропустить

Нарисуйте реакцию через Ketcher.

Главная страница / Новый проект 1 / Новая реакция

Новая реакция

+ Создать запись @ Дублировать

Стехиометрия Аналитические данные Вложения Таблицы

Редактор структур Ketcher

Нарисовать структуру

Реагенты

+ Добавить новый реагент

Реагенты еще не добавлены

+ Добавить новый реагент

Добро пожаловать в OdanLab

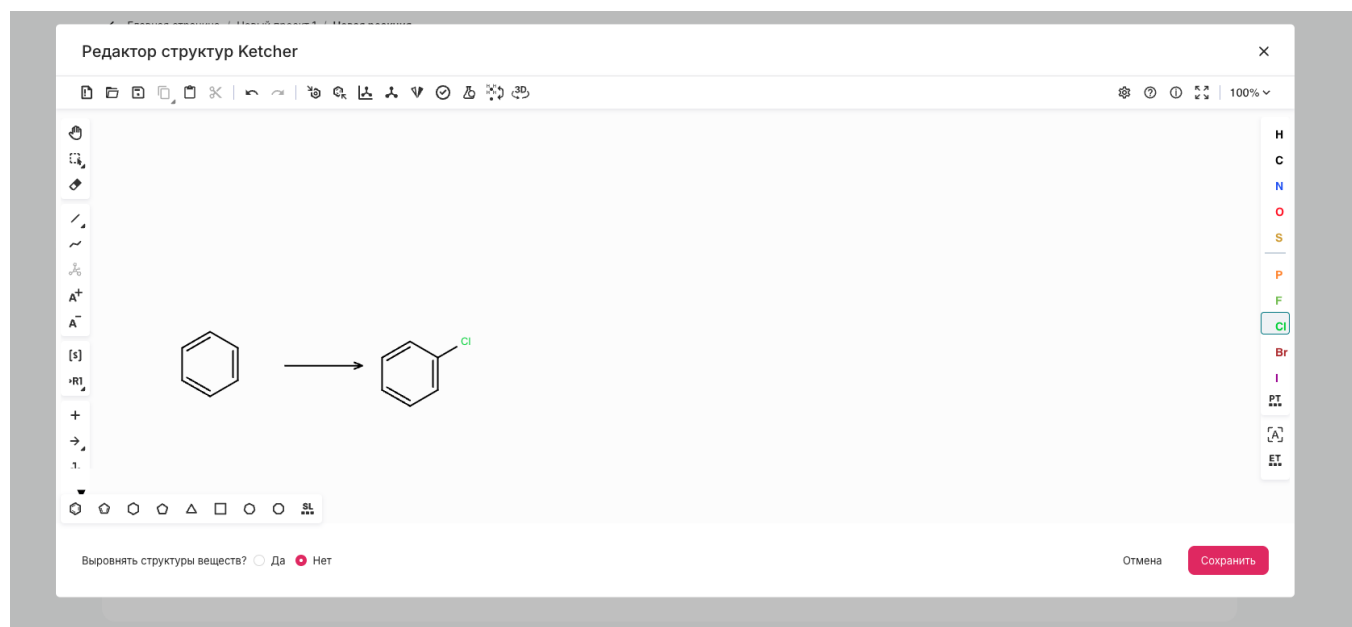
- ✓ Создать проект
- ✓ Создать эксперимент
- ⚠ Нарисовать реакцию через Ketcher

Реакция включает как минимум один реагент и один продукт. Таблица с нарисованными молекулами появится автоматически.

- ✓ Исследовать эксперимент
- ✓ Создать группу

Пропустить

Для этого дождитесь загрузки редактора и нарисуйте химическую реакцию, например, получение хлорбензола из бензола. Обязательно, используйте стрелочку реакции для создания реакции. Затем нажмите сохранить.



Ознакомьтесь с стехиометрией эксперимента.

Условия

Температура

°C

Давление

бар

Время

мин

Растворитель

Количество

мкл

+ Добавить параметр

Реагенты

+ Добавить новый реагент

Удалить

№	Название	Место хранения	Химическая формула	Мол. масса	Количество	Масса	Масса (брутто)	Концентрация	Плотность	Объем
1	Benzene	Местоположение	<chem>C6H6</chem>	78.11	1 ммоль	78.112 мг	78.112 мг	100 %	0.879 г/мл	88.864

+ Добавить катализатор

Продукты

+ Добавить новый продукт

Удалить

№	Структура	Лимитирующий?	Эквивалент	CAS	Название	Химическая формула	Молекулярная масса	Количество	Теоретическая масса	Выделенная масса
1	<chem>c1ccccc1Cl</chem>	☐ Нет	1	108-90-7	Chlorobenzene	<chem>C6H5Cl</chem>	112.56	1 ммоль	112.557 мг	

Добро пожаловать в OdanLab

Создать проект

Создать эксперимент

Нарисовать реакцию через Ketcher

Исследовать эксперимент

1

Стехиометрия. Рассчитайте количества реагентов, оцените выход продукта, добавьте заметки о процедуре и ссылки.

Далее

Пропустить

Добавьте заметки к эксперименту.

№ Структура Лимитирующий? Эквивалент CAS Название Химическая формула Молекулярная масса Количество Теоретическая масса Выделенная масса

1  Нет 1 108-90-7 Chlorobenzene c1ccccc1Cl 112.56 1 ммоль 112.557 мг

Заметки

Процедура

Введите текст или добавьте изображение

Ссылки

например, 10.1021/jacs.3c04968

Открыть ссылку на литературу

Главная страница

Проекты

Инвентарь

Telegram

Электронная почта

ОДАН ЧЕН

Добро пожаловать в OdanLab

Создать проект

Создать эксперимент

Нарисовать реакцию через Ketcher

Исследовать эксперимент

Notes

Procedure

References

1 **Стехиометрия.** Рассчитайте количества реагентов, оцените выход продукта, добавьте заметки о процедуре и ссылки.

Далее

Пропустить

Посмотрите аналитические данные.

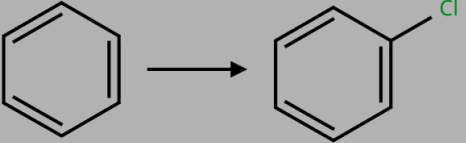
Главная страница / Новый проект 1 / FEK-1

FEK-1/001

Создано: 10.04.2026, 17:37 Последнее изменение: 10.04.2026, 17:37

Стехиометрия Аналитические данные Вложения Таблицы

Редактор структур Ketcher



Условия

Температура Давление Время

Растворитель Количество

Добавить параметр

Добро пожаловать в OdanLab

Создать проект

Создать эксперимент

Нарисовать реакцию через Ketcher

Исследовать эксперимент

FEK-23/23

Product 1

2 **Аналитические данные.** Запишите массу, детали выделения и данные ЯМР. Вы также можете проверить данные в OdanChem.

Создать группу

Пропустить

Запишите аналитические данные.

FEK-1/001

Создано: 10.04.2026, 17:37 | Последнее изменение: 10.04.2026, 17:38

Стехиометрия | **Аналитические данные** | Вложения | Таблицы

Продукт 1

Идентификация вещества

Название соединения: Chlorobenzene | CAS: 108-90-7

Выделенная масса: 100 мг | Выделенный выход: 88.84 %

Детали выделения

Детали выделения

ЯМР

ЯМР-данные: Новая ЯМР-запись

Проверить ЯМР в OdanChem

Редактор структур Ketcher

c1ccccc1Cl

Литературные данные ЯМР

¹H NMR (600 MHz, CDCl₃) δ 7.38 (d, J = 7.9 Hz, 2H), 7.33 (t, J = 7.7 Hz, 2H), 7.30 - 7.26 (m, 1H).

¹³C NMR (151 MHz, CDCl₃) δ 134.2, 129.7, 128.6, 126.4.

Добро пожаловать в OdanLab

- Создать проект
- Создать эксперимент
- Нарисовать реакцию через Ketcher
- Исследовать эксперимент

2 Аналитические данные. Запишите массу, детали выделения и данные ЯМР. Вы также можете проверить данные в OdanChem.

Далее

Пропустить

Создайте новую группу.

Группы 1

hawirig555@bpotogo.com'...

+ Добавить

Вступить

Статистика

Малая группа

Активен

Действует до -

Хранилище и файлы

0.0 MB из 5 GB использовано

Группа и план

1 / 10

Участники

hawirig555@bpotogo.com's group

Роль Зав. лаб. Создано: 10.04.2026 Последнее изменение: 10.04.2026

Проекты 1

+ Добавить проект

Новый проект 1

Статус Активен

Руководитель Fedor Kiiuev

Реакции 1

FK 10.04.2026

Инвентарь

5 последних запросов

Последние запросы

Последние упаковки

Запросы ещё не добавлены

+ Добавить поиск

Добро пожаловать в OdanLab

Создать проект

Создать эксперимент

Нарисовать реакцию через Ketcher

Исследовать эксперимент

Создать группу

Groups 5

Plank & Furious

Mel Squad

The Yield Hunters

Probably Explosive

+ Add New

Join Group

Создавайте группы, в которые можно добавлять проекты. В группах вы можете управлять правами участников и хранить информацию об инвентаре.

Пропустить

Добавьте новых участников в группу.

Группы 2

hawirig555@bpotogo.c...

Новая группа 1

Роль Зав. лаб. Создано: 10.04.2026 Последнее изменение: 10.04.2026

Проекты

Проекты ещё не добавлены

+ Добавить проект

Инвентарь

5 последних запросов

Последние запросы Последние упаковки

Запросы ещё не добавлены

+ Добавить поиск

Статистика

Малая группа Активен

Действует до -

Хранилище и файлы

0.0 MB из 5 GB использовано

Группа и план

1 / 10

Участники

Добро пожаловать в OdanLab

- ✓ Создать проект
- ✓ Создать эксперимент
- ✓ Нарисовать реакцию через Ketcher
- ✓ Исследовать эксперимент
- ✓ Создать группу

Добавить новых участников в группу

Invite Group Members

gigachemist@gmail.com

Omriy Mendeleev gigachemist@gmail.com Research

Cancel Invite

Здесь вы можете пригласить людей в свою группу для плодотворного

Завершить обучение

Перейдите в инвентарь.

OdanLab

EnRu

Новая группа 1

Главная страница

Проекты

Инвентарь

Fedor Kluev

Главная страница / Поиск в инвентаре

Поиск в инвентаре

Создать запись

Идентификация вещества

Название соединения

например, Paclitaxel

CAS

например, 33069-62-4

ID упаковки

например, 200

Химическая формула

например, C47H51NO14

Молекулярная масса

0

0

2000

2000

Хранение и локация

Комната

например, 302

Шкаф

например, Шкаф B2

Детали поиска

Искать эту структуру как

Нарисованную

Подструктуру

Поиск

Очистить фильтры

Редактор структур Ketcher



Нарисовать структуру

Создайте новую запись.

Главная страница / Поиск в инвентаре

Поиск в инвентаре

Идентификация вещества

Название соединения

например, Paclitaxel

ID упаковки

например, 200

Молекулярная масса

0

Хранение и локация

Комната

например, 302

Детали поиска

Искать эту структуру как

Поиск

Очистить фильтры

Создание новой записи

Идентификация вещества

Название соединения

Paclitaxel

CAS

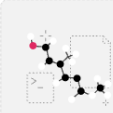
33069-62-4

Хим. формула

C₄₇H₅₁NO₁₄

Поиск

Редактор структур Ketcher



Нарисовать структуру



Найти вещество

На данный момент нет данных для отображения

Отмена

Создать запись

Создать запись

Используйте текстовый поиск, поиск по CAS, Химической формуле или структуре. Выполните поиск.

Создание новой записи



Идентификация вещества

Название соединения

Ethanol

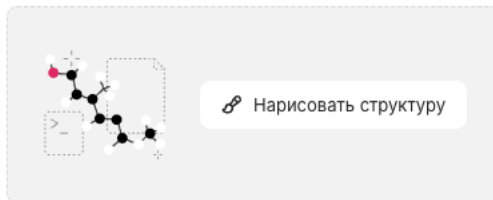
CAS

33069-62-4

Хим. формула

C₄₇H₅₁NO₁₄

Редактор структур Ketcher



Поиск

Результаты поиска

Найдено упаковок: 1

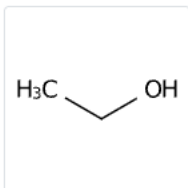
Структура

Название
вещества

Химическая
формула

Молекулярная
масса

CAS



Ethanol

C₂H₆O

46.07

64-17-5

Отмена

Создать запись

Выберите запись и создайте запись.

[← Главная страница](#) / [Поиск в инвентаре](#) / [Создать запись](#)

Ethanol

Идентификация вещества

Название

Ethanol

CAS

64-17-5

Молекулярная масса

46.07

г/моль

Химическая формула

C₂H₆O

Физико-химические свойства

Плотность при 20 °C

0.79

г/мл

Температура плавления

-114

°C

Темп. кипения при 1 атм

78

°C

Информация об инвентаре

Размер упаковки

1

г

В наличии

0

г

Комната

например, Лаборатория 3С

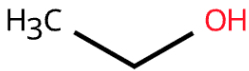
Ячейка/Шкаф

например, Полка B2

ID упаковки

1

Структура вещества



Данные по безопасности



Вложения 0

Перетащите файл или нажмите для загрузки

Заметки

Комментарий

например, Похоже на черно-коричневый гудрон

Здесь вы можете ознакомиться с данными из справочников, а также указать информацию о размере упаковки, локации, добавить вложения и комментарий к упаковке.

ЯМР

Литературные данные ЯМР

¹H NMR (400 MHz, CDCl₃): δ 1.25 (t, J = 7 Hz, 3H), 3.72 (q, 7d, 2H), 1.32 (sc,d, 1H)

¹³C NMR (101 MHz, CDCl₃): δ 18.41 (CH3), 58.28 (CH2)

ЯМР-данные

Новая ЯМР-запись

Проверить ЯМР в OdanChem

например, Похоже на черно-коричневый гудрон

Условия хранения

Keep container tightly closed in a dry and well-ventilated place. Containers which are opened must be carefully resealed and kept upright to prevent leakage. Hygroscopic. Storage class (TRGS S10): Flammable liquids

Информация о производстве

Номер партии

например, 2024-045

Чистота

например, 97

%

Годен до

ДД.ММ.ГГГГ

Дата производства

10.04.2026

Производитель

например, Sigma Aldrich

Затем вы можете ознакомиться и сохранить ЯМР-данные, условия хранения и информацию о производстве.

Для завершения работы необходимо в терминале, из которого запускали ПО, ввести команду `docker compose down`.

2. Поиск по соединению

После логина в систему нажать на кнопку «Поиск по соединению»



USER



ПОИСК ПО СОЕДИНЕНИЮ



ПОИСК ПО СПЕКТРУ

ПОИСК ПО ИК СПЕКТРУ

АНАЛИЗИРОВАТЬ СМЕСЬ



ПОИСК ПУБЛИКАЦИЙ



ЯМР В СТРУКТУРУ

СТРУКТУРА В ЯМР

Самые популярные вопросы

Почему я не могу найти химическое соединение?

Какие возможности поиска доступны?

Контакты: contacts@odanchem.org

Если у вас есть вопросы и идеи по улучшению, напишите нам.

[Советы по использованию OdanChem](#)

На странице ввода структуры можно либо нажать на центральное поле с изображением молекулы и нарисовать молекулу, либо нажать на надпись 550-53-0 под полем текстового ввода (стрелка 1) (этот CAS-номер перенесется в текстовое поле), и нажать на синюю стрелку (2) – структура для запроса подгрузится сама. После чего станет активна кнопка «точный поиск» (3), на которую следует нажать.



USER

Поиск соединений

Нарисуйте структуру здесь

1 → 530-53-0
пример 530-53-0

2 →

ТОЧНЫЙ ПОИСК

ПОИСК ПО ПОДСТРУКТУРЕ

3 →

Контакты: contacts@odanchem.org

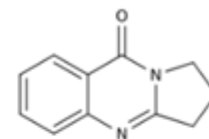
Если у вас есть вопросы и идеи по улучшению, напишите нам.

[Советы по использованию OdanChem](#)

Страница с результатами выполнения команды будет содержать набор характеристик молекулы, найденных в нашей системе.



Точный поиск

[USER](#)[ПОМОЩЬ](#)

ЯМР спектры

[H NMR\(2\)](#) [C NMR\(2\)](#)

Источник	Строка спектра	Качество %	Обобщенное кач...	
10.1039/c9cc07173c	^1H NMR (400 MHz, DMSO- d_6) δ 8.11 (d, J = 7.9 Hz, 1H), 7.80-7.74 (m, 1H), 7.60 (d, J = 8.1 Hz, 1H), 7.50 - 7.44 (m, 1H), 4.06 (t, J = 7.2 Hz, 2H), 3.08 (t, J = 7.9 Hz, 2H), 2.16 (dd, J = 14.9, 7.6 Hz, 2H).	85	81	ЕСТЬ ОШИБКА?
10.1002/chem.200401112	^1H NMR (400 MHz, CDCl_3): δ = 2.21 (q, 2H; $\text{NCH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2$), 3.10 (t, J = 7.8 Hz, 2H; $\text{NCH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2$), 4.13 (t, J = 7.1 Hz, 2H; $\text{NCH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2$), 7.35-8.22 ppm (m, 4Ar-H);	0	77	ЕСТЬ ОШИБКА?

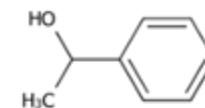
[<](#) [1](#) [>](#)

Свойства

[ТЕМПЕРАТУРА ПЛАВЛЕНИЯ\(1\)](#) [МСВР\(2\)](#)

Источник	Данные	Качество	
10.1039/c9cc07173c	M.P 106-107 °C.	81	ЕСТЬ ОШИБКА?

Результат в разделе «свойства» содержит редкие данные, такие как условия разделения энантиомеров на хиральной высокоэффективной жидкостной хроматографии (ВЭЖХ, 1), газовой хроматографии (ГХ, 2):



ЯМР спектры

[H NMR\(1\)](#) [C NMR\(1\)](#)

Источник	Строка спектра	Качество %	Обобщенное кач...	
10.1021/acscatal.3c05100	^1H NMR (500 MHz, CDCl_3) δ 1.49 (d, $J=6.5$ Hz, 3H), 4.87 (q, $J=6.5$ Hz, 1H), 7.26-7.32 (m, 1H), 7.33-7.40 (m, 4 H);	78	61	ЕСТЬ ОШИБКА?

< 1 >

Свойства

[ВЭЖХ\(1\)](#)

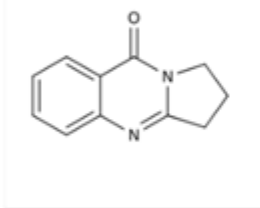
[ХИРАЛЬНАЯ ГХ\(1\)](#)

2

Источник	Данные	Качество	
10.1021/ACSCATAL.3C05100	HP_LC [<i>n</i> -hexane- <i>i</i> -PrOH (97:3, v/v); $f = 1.0$ mL/min ($p = 4.4$ MPa); $\lambda = 210$ nm (Chiralcel OD-H)]; $t_R = 10.84$ min (R-isomer) and 12.64 min (S-isomer).	61	ЕСТЬ ОШИБКА?

< 1 >

Поле «ЯМР спектры» содержит все спектры Ядерного магнитного резонанса в явном виде. Двойной щелчок на строку спектра ЯМР открывает окно с изображением спектра ядерного магнитного резонанса и ссылку на литературный источник этого спектра.



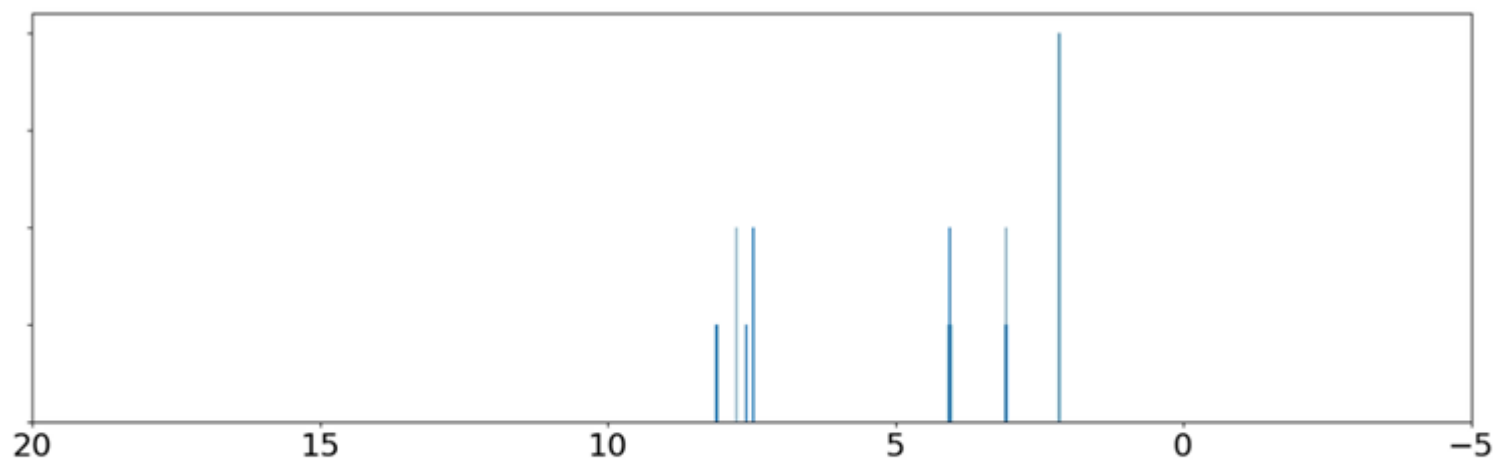
Spectrum

[USER](#)

¹H-NMR (400 MHz, DMSO-d₆) δ 8.11 (d, *J* = 7.9 Hz, 1H), 7.80-7.74 (m, 1H), 7.60 (d, *J* = 8.1 Hz, 1H), 7.50 - 7.44 (m, 1H), 4.06 (t, *J* = 7.2 Hz, 2H), 3.08 (t, *J* = 7.9 Hz, 2H), 2.16 (dd, *J* = 14.9, 7.6 Hz, 2H).

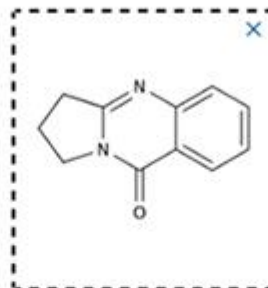
[ACS](#)
[WILEY](#)
[ELSEVIER](#)
[RSC](#)
[GOST](#)

Yang, J.; Hu, X.; Liu, Z.; Li, X.; Dong, Y.; Liu, G. Cp*Co^{III}-catalyzed formal [4+2] cycloaddition of benzamides to afford quinazolinone derivatives *Chem. Comm.*, **2019**, 55, 13840-13843

[REPORT ERROR](#)
[DOWNLOAD RIS](#)
[COPY](#)


В случае нажатия кнопки «Поиск по подструктуре»

Поиск соединений



Вставьте CAS, IUPAC, SMILES



пример 530-53-0

точный поиск



поиск по подструктуре



Контакты: contacts@odanchem.org

Если у вас есть вопросы и идеи по улучшению, напишите нам.

[Советы по использованию OdanChem](#)

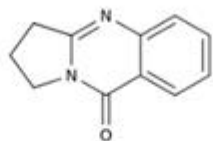
Отобразится страница, содержащая все молекулы, содержащие запрошенный фрагмент структуры. Есть возможность применять различные фильтры, заявленные в верхней части страницы и сужать результаты поиска.



Поиск по подструктуре

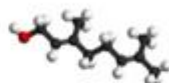
[USER](#)[ПОМОЩЬ](#)[НОВЫЙ ПОИСК](#)

Поиск по подструктуре



Дополнительный фильтр

Нарисуйте структуру здесь



Фильтр

Без радикалов ☒Поиск по таутомерам ☐

Имеет IR?

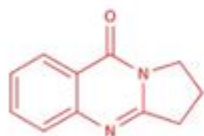
H_NMR

Имеет ИК спектр

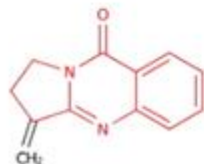
Имеет свойство

[ПРИМЕНИТЬ ФИЛЬТР](#)

Найдено: 30 молекул



Найдено публикаций: 6

Melting point найдено: 1
HRMS найдено: 2H NMR найдено спектров: 2
C NMR найдено спектров: 2

Найдено публикаций: 1

Melting point найдено: 1
HRMS найдено: 1C NMR найдено спектров: 1
H NMR найдено спектров: 1

Найдено публикаций: 1

Melting point найдено: 1

H NMR найдено спектров: 1

3. Поиск по спектрам

На главной странице можно нажать на кнопку «поиск по спектру»



ПОИСК ПО СОЕДИНЕНИЮ



ПОИСК ПО СПЕКТРУ

ПОИСК ПО ИК СПЕКТРУ

АНАЛИЗИРОВАТЬ СМЕСЬ



ПОИСК ПУБЛИКАЦИЙ



ЯМР В СТРУКТУРУ

СТРУКТУРА В ЯМР

Самые популярные вопросы

Почему я не могу найти химическое соединение?

Какие возможности поиска доступны?

Контакты: contacts@odanchem.org

Если у вас есть вопросы и идеи по улучшению, напишите нам.

[Советы по использованию OdanChem](#)

Это приведет на страницу поиска по спектру, где можно вводить данные инфракрасного или ЯМР спектра и выполнять поиск соответствующих им соединений.

В качестве примера можно нажать на строку ^{13}C NMR спектра (1) и кнопку «Отправить» (2).



USER

ПОМОЩЬ

Тип спектра

C NMR

?

Растворитель

CDCl₃

?

Сдвиг

No rows

ДОБАВИТЬ ПИК

Перетащите файл с вашим спектром сюда.

Нет файлов для загрузки

Для NMR данных: ZIP архив с папкой спектра.

Поддерживаются файлы Bruker и Varian. Файл 1r должен быть в папке Bruker

Только спектры нормального качества будут правильно обработаны (S/N > 10/1, плоская базовая линия).

Для IR данных: .dx файл со спектром

13C NMR (100 MHz, CDCl₃) δ 19.5, 32.5, 46.5, 120.5, 126.3, 126.4, 126.8, 134.2, 149.1, 159.5, 161.0

?

ex. 13C NMR (100 MHz, CDCl₃) δ 19.5, 32.5, 46.5, 120.5, 126.3, 126.4, 126.8, 134.2, 149.1, 159.5, 161.0

ex. IR (KBr) 2924, 1675, 1621, 1465, 1384, 1336, 1268, 1022, 771, 694 cm⁻¹

1

2

ОТПРАВИТЬ

?

После чего вы будете перенаправлены на страницу предварительного просмотра спектра, на которой необходимо нажать кнопку «Поиск спектров».



Режим поиска спектров

reaction mixture



USER

ПОМОЩЬ

Тип спектра

C NMR



Растворитель

CDCl₃

Сдвиг

19.5

x

32.5

x

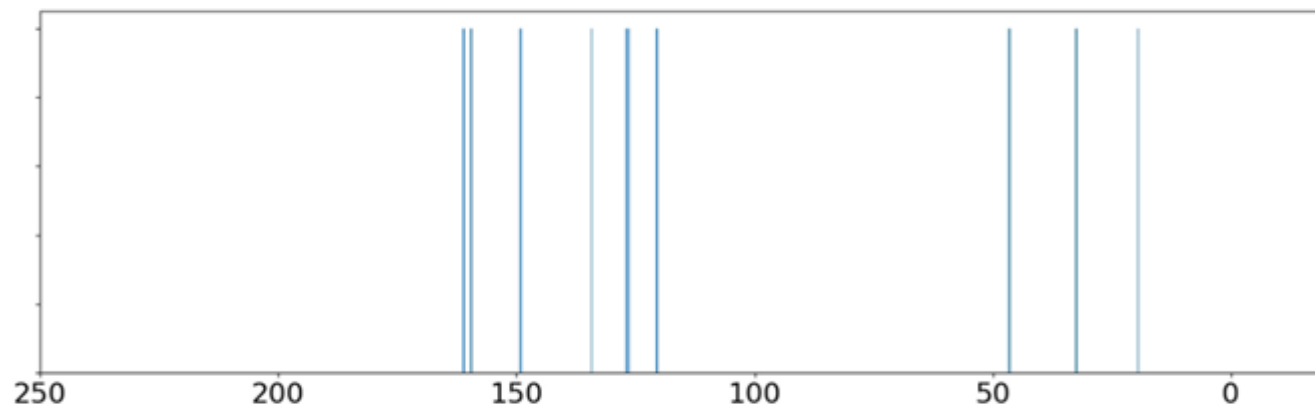
46.5

x

120.5

x

ДОБАВИТЬ ПИК



РЕДАКТИРОВАТЬ СПЕКТР



ПОИСК СПЕКТРОВ



В результате откроется страница результатов поиска, на которой можно ознакомиться со списком молекул, соответствующих запрошенному спектру.

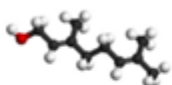
Аналогично можно ввести в запрос инфракрасный спектр из примера и выполнить поиск по нему.

Все эти спектры также могут быть введены в соответствующее поле в виде файла.



Фильтр подструктуры

Нарисуйте структуру здесь

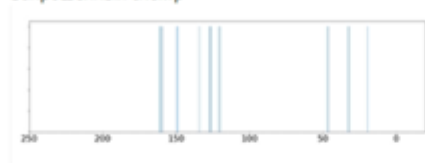


Reaction Mixture Поиск спектров

USER

ПОМОЩЬ

Запрошенный спектр



Растворитель

CDCl₃

Фильтр молекулярного веса

Начало

Конец

ДОБАВИТЬ

Будут показаны только молекулы с молекулярной массой в указанном диапазоне(ах)

Фильтр обязательных пиков

Позиция пика

Отметить как обязательный

19.5

☐

32.5

☐

46.5

☐

120.5

☐

Будут показаны только спектры, включающие все эти пики

НОВЫЙ ПОИСК



РЕДАКТИРОВАТЬ ПОИСК



ПРИМЕНИТЬ



Структура	Строка спектра	Качество %	Обобщенное кач...	Источник	
	C_NMR (100 MHz, CDCl ₃): d=19.5 (NCH ₂ CH ₂ CH ₂), 32.5 (NCH ₂ CH ₂ CH ₂), 46.5 (NCH ₂ CH ₂ CH ₂), 120.5, 126.2, 126.4, 126.7, 134.1, 149.1 (Ar-C), 159.4 (CO), 160.9 ppm (N=C)	69	77	10.1002/chem.200401112	ЕСТЬ ОШИБКА?
	C_NMR (125 MHz, CDCl ₃): d = 126.1 (C-2), 149.3 (C-1) ppm.	87	83	10.1039/c0dk01223h	ЕСТЬ ОШИБКА?
	C_NMR (100 MHz, CDCl ₃): d= 46.4, 32.3 ppm.	86	70	10.1007/s00706-017-2042-5	ЕСТЬ ОШИБКА?

4. Работа с историей поисков

Результаты поиска можно пересекать и объединять, этот функционал доступен в личном кабинете. Чтобы в него попасть необходимо нажать на имя пользователя в правом верхнем углу.

Затем нажать «История поиска».



ПОИСК ПО СОЕДИНЕНИЮ



ПОИСК ПО СПЕКТРУ

ПОИСК ПО ИК СПЕКТРУ

АНАЛИЗИРОВАТЬ СМЕСЬ



ПОИСК ПУБЛИКАЦИЙ



ЯМР В СТРУКТУРУ

СТРУКТУРА В ЯМР



USER

Самые популярные вопросы

Почему я не могу найти химическое соединение?

Какие возможности поиска доступны?

Контакты: contacts@odanchem.org

Если у вас есть вопросы и идеи по улучшению, напишите нам.

Советы по использованию OdanChem



Личная информация

Полный аккаунт

User
Super
lesper@user.com
-
-

По любым вопросам: contacts@odanchem.org

[Политика конфиденциальности](#)

СОХРАНИТЬ

ИЗМЕНИТЬ ПАРОЛЬ

ИСТОРИЯ ПОИСКА

ВЫЙТИ

УДАЛИТЬ АККАУНТ

На ней можно выбрать два поиска, и нажать на одну из кнопок пересечения/объединения слева.



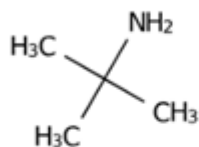
История поиска

USER

Пересечение по соединениям 	☐	I R поиск спектра 15 молекулы 8 публикации 15 спектры		2025-08-25 x
Объединение по соединениям 	☐	C NMR поиск спектра 4 молекулы 4 публикации 4 спектры		2025-08-25 x
Пересечение по публикациям 	☐	Точный поиск 1 молекулы 7 публикации		2025-08-25 x
Объединение по публикациям 	☐	Точный поиск 1 молекулы 6 публикации		2025-08-25 x
	☐	Поиск по подструктуре 30 молекулы 6 публикации		2025-08-25 x
	☐	Точный поиск 1 молекулы 6 публикации		2025-08-25 x

Результат пересечения/объединения по молекулам будет выглядеть так:

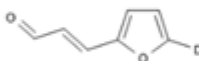
Found 19 compounds



Publications found: 10

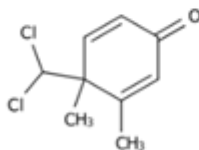
C NMR spectra found: 1

H NMR spectra found: 1



Publications found: 1

C NMR spectra found: 1

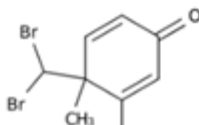


Publications found: 1

Melting point found: 1

H NMR spectra found: 1

C NMR spectra found: 1



Publications found: 1

Melting point found: 1

H NMR spectra found: 1

C NMR spectra found: 1

5. Функции предсказания

Для предсказания спектра ядерного магнитного резонанса молекулы по ее структуре необходимо нажать на кнопку «Структура в ЯМР»



ПОИСК ПО СОЕДИНЕНИЮ



ПОИСК ПО СПЕКТРУ

ПОИСК ПО ИК СПЕКТРУ

АНАЛИЗИРОВАТЬ СМЕСЬ



ПОИСК ПУБЛИКАЦИЙ



ЯМР В СТРУКТУРУ

СТРУКТУРА В ЯМР

Самые популярные вопросы

Почему я не могу найти химическое соединение?

Какие возможности поиска доступны?

Контакты: contacts@odanchem.org

Если у вас есть вопросы и идеи по улучшению, напишите нам.

[Советы по использованию OdanChem](#)

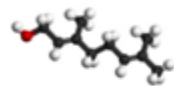
Это приводит на страницу ввода структуры, аналогичную поиску по соединению. Можно нажать на надпись 550-53-0 (1), затем на синюю стрелку (2) и на кнопку «предсказать C13 ЯМР» (3).



Предсказать ^{13}C ЯМР по структуре

[USER](#)[ПОМОЩЬ](#)

Нарисуйте структуру здесь



Вставьте CAS, IUPAC, SMILES

пример 530-53-0

ПРЕДСКАЗАТЬ ^{13}C ЯМР

?

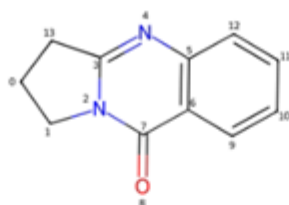
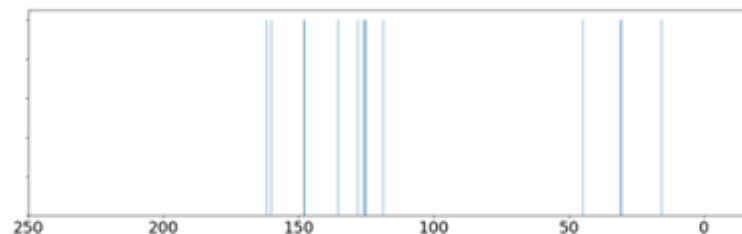
1

2

3

После этого откроется страница с результатами предсказания.

Предсказанный спектр



Атом №	Химический сдвиг
0	15.62
13	30.67
1	44.88
6	118.73
12	125.34
10	125.98
9	128.05
11	135.41
5	148.03
3	160.18
7	161.93

Для предсказания структуры молекулы по спектру ядерного магнитного резонанса необходимо нажать на кнопку «ЯМР в структуру»



USER



ПОИСК ПО СОЕДИНЕНИЮ



ПОИСК ПО СПЕКТРУ

ПОИСК ПО ИК СПЕКТРУ

АНАЛИЗИРОВАТЬ СМЕСЬ



ПОИСК ПУБЛИКАЦИЙ



ЯМР В СТРУКТУРУ

СТРУКТУРА В ЯМР

Самые популярные вопросы

Почему я не могу найти химическое соединение?

Какие возможности поиска доступны?

Контакты: contacts@odanchem.org

Если у вас есть вопросы и идеи по улучшению, напишите нам.

Советы по использованию OdanChem

Откроется поле ввода спектра, аналогичное поиску по спектру. Можно ввести спектр из примера (1), и нажать кнопку «отправить», затем нажать «предсказать структуру».



Предсказать структуру из спектра ЯМР

Работает только для ¹³C ЯМР ЧИСТОГО соединения в CDCl₃

Перетащите файл с вашим спектром сюда.

Нет файлов для загрузки

Для данных ЯМР: ZIP архив с папкой спектра.
Поддерживаются файлы Bruker и Varian. Файл 1g должен быть в папке Bruker
Только спектры нормального качества будут правильно обработаны (S/N > 10/1, плоская базовая линия).
Для ИК данных: .dx файл со спектром

Вставьте строку спектра здесь

пример ¹³C ЯМР (100 MHz, CDCl₃) δ 19.5, 32.5, 46.5, 120.5, 126.3, 126.4, 126.8, 134.2, 149.1, 159.5, 161.0

1

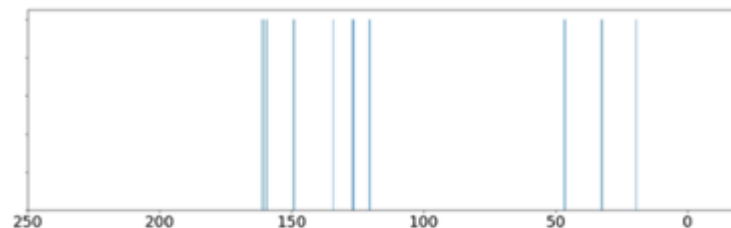
2

ОТПРАВИТЬ



На этой целевой странице будут постепенно появляться молекулы, которые система предсказывает по запрошенному ЯМР спектру.

Спектр



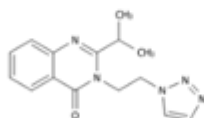
Включенные атомы

Исключенные атомы

Предсказанные структуры

Анализ ИИ в процессе: 19%

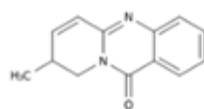
Разница: 1.07



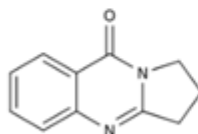
[Поиск в OdanChem](#)

[Предсказать ЯМР 13C](#)

Разница: 2.05



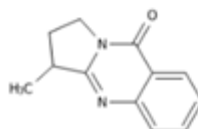
Разница: 1.24



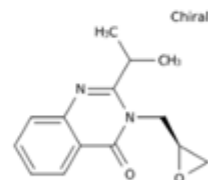
[Поиск в OdanChem](#)

[Предсказать ЯМР 13C](#)

Разница: 2.21



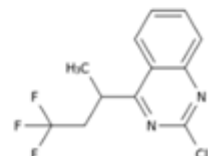
Разница: 1.26



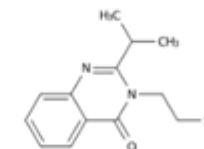
[Поиск в OdanChem](#)

[Предсказать ЯМР 13C](#)

Разница: 2.45



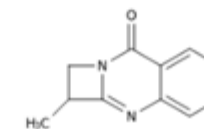
Разница: 1.40



[Поиск в OdanChem](#)

[Предсказать ЯМР 13C](#)

Разница: 3.16



Ректор

М.В. Корняков