Представљање хемијских формула у радовима

Chemcial Markup Language - CML

XML је данас најкоришћеније приступ за обезбеђивање семантике у научним документима, као што су MathML (за математику), SBML/BIOPAX (за биологију), GML and KML (за геометрију), SVG (за графику) and NLM-DTD, ODT and OOXML (за структурисање докумената).

Chemical Markup Language (ChemML or CML) је приступ за управљање информацијама о молекулима коришћењем алата као што су језик за означавање XML и програмског језика и окружења Java.

Ово је прва доменски специфична имплементација која је стриктно базирана на XML-у.

CML обезбеђује подршку за највећи део хемије, нарочито молекула, једињења, реакција, спектара, кристала и рачунарске хемије (compchem).

Chemcial Markup Language – CML (2)

Традиционално, хемијске информације су биле чуване у различитим форматима (типовима) датотека, што је спречавало њихову поновну искористивост.

CML користи преносивост XML-а да би помогао креирање интероперабилних докумената од стране CML аутора и хемичара. Постоји велики број алата који могу генерисати, обрађивати и прегледати CML документе. Издавачи могу, коришћењем CML-а, дистрибуирати хемију преко XML докумената.

CML може да подржи широк опсег хемијских појмова:

- молекуле
- реакције
- спектре и аналитичке додатке
- рачунарску хемију
- хемијску кристалографију и материјале

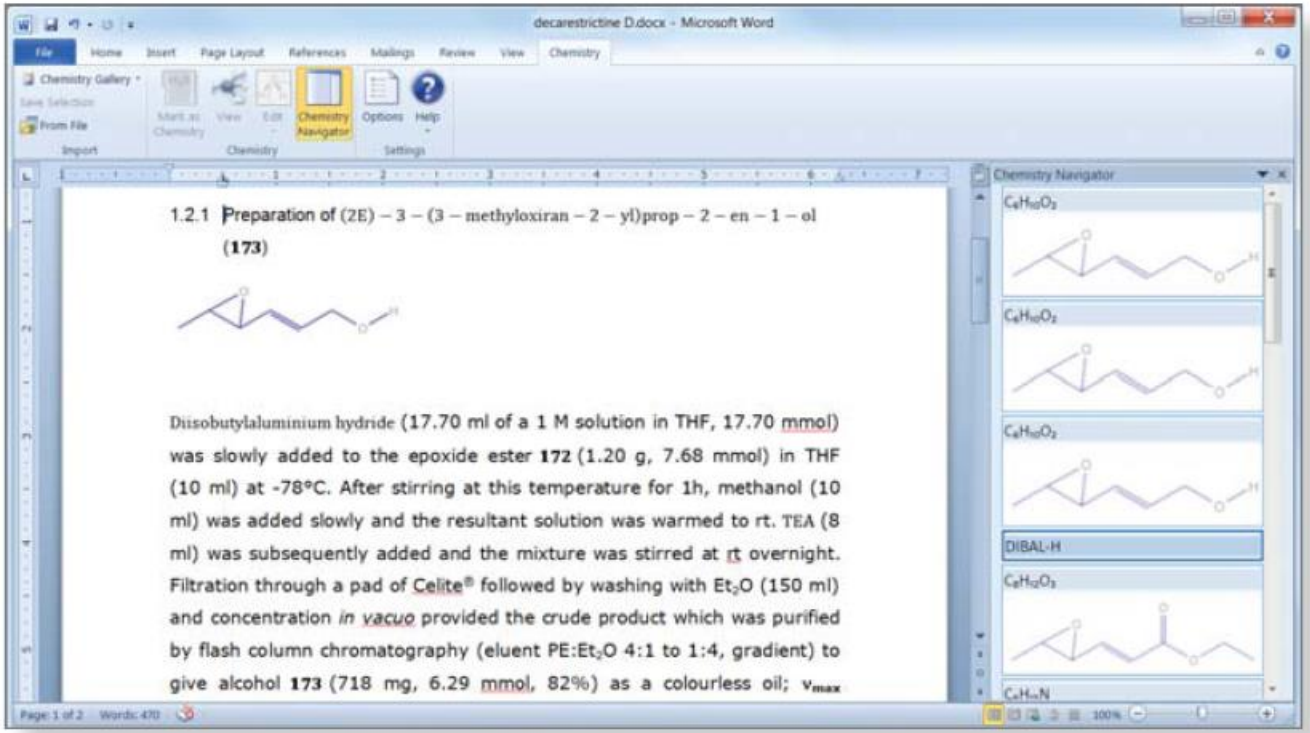
Chemcial Markup Language – CML (3)

```
<cml convention="conventions:molecular" xmlns="http://www.xml-cml.org/schema"
conventions="http://www.xml-cml.org/convention/" cmlDict="http://www.xml-
cml.org/dictionary/cml/" nameDict="http://www.xml-cml.org/dictionary/cml/name/">
  <molecule id="sulfuric acid">
    <formula concise="sulfuric acid"/>
  </molecule>
  <molecule id="">
    <formula title="[Cu(NH3)4]2+ SO42-]">
      <formula formalCharge="+2">
        <atomArray elementType="Cu"/>
        <formula count="4">
          <atomArray elementType="N H" count="1 3"/>
        </formula>
      </formula>
      <formula formalCharge="-2">
        <atomArray elementType="S O" count="1 4"/>
      </formula>
    </formula>
  </molecule>
</cml>
```

Chemistry Add-inn for Word

Свака наука има свој језик. За успех ма ког научног истраживања је од огромног значаја могућност комуникације и сарадње коришћењем језика те науке.

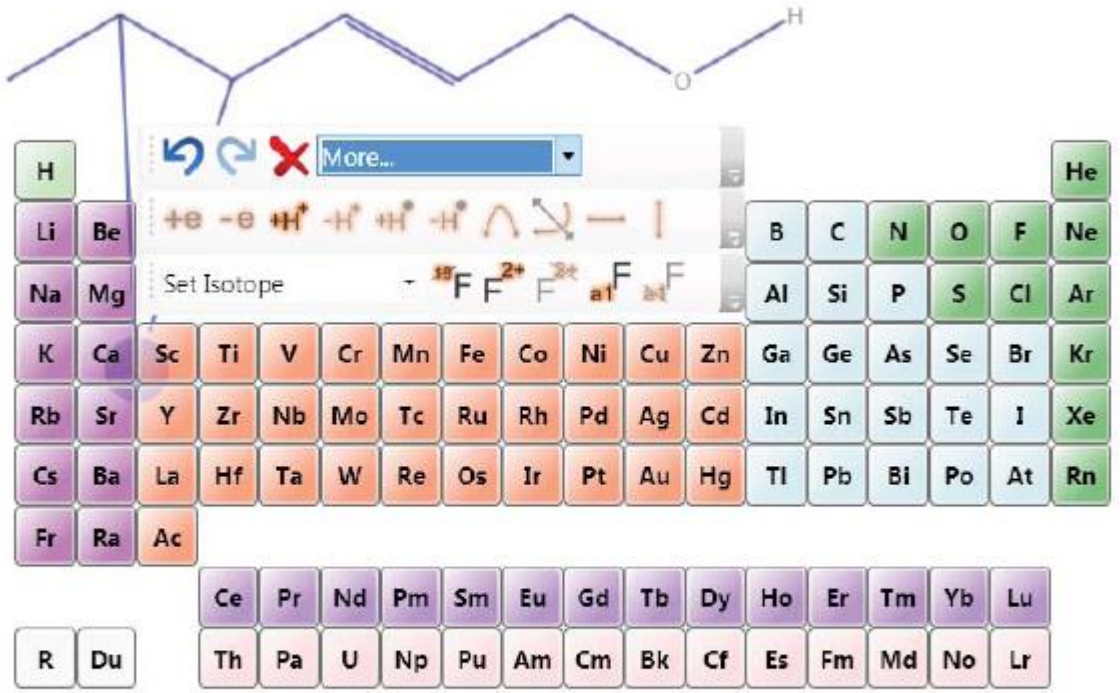
У хемији и билогији, не само да постоји специфичан језик, већ је то специфичан језик са својим специфичним симболима.



Name and 2D views of the same chemical shown in the document, along with the Chemistry Navigator; which displays all of the chemistry zones within the current document.

Chemistry Add-inn for Word (2)

Програм Chemistry Add-in for Word олакшава студентима, хемичарима и истраживачима да убаце и модификују хемијске информације, као што су ознаке, формуле и 2D прикази, из и у Microsoft Office Word. Он упреже моћ језика Chemical Markup Language (CML) који представља XML за хемију.



The 2D Editor showing the Periodic Table of Elements lookup.

Chemistry Add-inn for Word (3)

CML допушта истраживачима не само да креирају и мењају хемијске формуле у Word-у, већ и да у документ укључе и податке који се садрже у овим формулама.

Chemistry Add-in и CML обезбеђују да хемиски докуметни буду отворени, читљиви и доступни људима и другим технологијама.

Поред функционалности ауторства, Chemistry Add-in допушта да корисник маркира тзв. „инлајн “ хемијске зоне, исцртавање високо квалитентних визуалних приказа хемијских структура, као и могућност чувања и излагања хемијских информација са богатом семантиком у глобалној хемијској заједници.

Chemistry Add-in supports подржава сценарије објављивања и истраживања података за ауторе, читаоце, издаваче и све остале у информатичкој хемијској заједници.

Chemistry Add-inn for Word (4)

Коришћењем Chemistry Add-in, могуће је:

- Креирати „инлајн“ хемијске зоне (контроле које садрже информације о молекулу) ради репрезентације хемијских података.
- Креирати хемијску зону уношењем уобичајеног назива (на енглеском – нпр. “water”), а потом конвертовати ту хемијску зону да буде представљена на жељени начун.
- Пребацити са тривијалног наива молекула на његову концизну формулу или на његову 2D репрезентацију.
- Представити молекуле помоћу високо квалитетног 2D структурног дијаграма и користити уграђени едитор за модификовање структуре.

Chemistry Add-inn for Word (5)

Коришћењем Chemistry Add-in, могуће је:

- Извршити увоз молекула из других алата за графичко едитовање, мењати њихову структуру и сачувати измењене молекуле у Галерији, тако да ти исти молекули могу бити коришћени и у разним другим документима.
- Сачувати и изложити хемијске информације на семантички богат начин.

Захвалница

Део материјала презентације је преузет са адресе
http://research.microsoft.com/en-us/projects/chem4word/

Део материјала презентације је преузет са адресе
http://www.xml-cml.org/

Део материјала презентације је преузет са адресе
http://www.bioclipse.net/