

МІНІСТЕРСТВО ОХОРОНИ ЗДОРОВ'Я УКРАЇНИ  
НАЦІОНАЛЬНИЙ ФАРМАЦЕВТИЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ  
Кафедра медичної хімії



## **Молекулярний дизайн потенційних АФІ**

**методичні рекомендації з підготовки до підсумкового  
модульного контролю**

для здобувачів вищої освіти 2 курсу  
освітньо-наукового рівня вищої освіти доктора філософії «226  
Фармація, Промислова фармація»

Харків  
НФаУ  
2020

**УДК 615.011:615.2.:615.071:54.062**

Рекомендовано засіданням кафедри  
(Протокол № 1 від 20 серпня 2020 р.)

**Автори:** Л.О. Перехода, В.О. Зубков, М.М. Сулейман, А.І. Федосов, І. А. Сич,  
З.Г. Єрьоміна, Л.О. Гріневич

Методичні рекомендації призначені для здобувачів вищої освіти 2 курсу освітньо-наукового рівня вищої освіти доктора філософії «226 Фармація, Промислова фармація»

Методичні рекомендації містять перелік теоретичних питань, приклад білета і критерії оцінювання для підготовки здобувачів вищої освіти до підсумкового модульного контролю.

Методичні рекомендації допоможуть здобувачам вищої освіти при підготовці до підсумкового модульного контролю.

**УДК 615.011:615.2.:615.071:54.062**

© Перехода Л.О., Зубков В.О,  
Сулейман М.М., 2020

© **НФаУ, 2020**

## ЗМІСТ

	Стор.
Вступ .....	4
Психолого-педагогічні рекомендації для підготовки здобувачів вищої освіти до підсумкового модульного контролю	6
Перелік теоретичних питань для підготовки здобувачів вищої освіти до підсумкового модульного контролю .....	8
Приклад білету.....	15
Критерії оцінювання підсумкового модульного контролю .....	18
Перелік основних джерел літератури для підготовки до підсумкового модульного контролю .....	20

## ВСТУП

Комп'ютерне конструювання лікарських засобів (ККЛЗ) на сьогодні стало незамінним інструментом у тривалому процесі пошуку та розробки лікарських засобів. Створення принципово нових ліків є дуже складною, дорогою і багатоступеневою процедурою, яка вимагає, до того ж, значної кількості часу. В останні десятиліття у світовій практиці докорінно змінилася парадигма пошуку нових лікарських засобів, шляхом широкого впровадження різноманітних комп'ютерних методів, таких як: скринінг *in silico*, QSAR підходи, молекулярний докінг, прогнозування параметрів ADMET та ін. Пройшовши кілька етапів становлення, комп'ютерне конструювання лікарських засобів у наш час стало, де-факто, невід'ємним інструментом, який необхідний на різних етапах розробки ліків. Також слід зазначити що ККЛЗ, крім своєї практичної спрямованості застосування, надає глибокі науково-теоретичні прийоми пізнання матерії. У кінцевому підсумку воно надає дослідникам варіанти розуміння хімічних и біологічних систем з іншої точки зору, отримуючи інформацію, яку нелегко отримати під час лабораторного аналізу. Оволодіння різними видами підходів ККЛЗ та їх програмного забезпечення а також використання всіх обчислювальних ресурсів, які є цінними для проектування ліків, безумовно, є важливим для того, щоб стати успішним науковим фармацевтичним фахівцем у сучасному світі.

Предметом вивчення «Молекулярного дизайну потенційних АФІ» є: молекулярний дизайн потенційних біологічно активних речовин; віртуальний скринінг; якісні та кількісні співвідношення «структура–активність» (SAR та QSAR-аналіз), метод молекулярного докінгу; *in silico* методи оптимізації «структур-лідерів». «Молекулярний дизайн потенційних АФІ» інтегрує та розширює знання, отримані здобувачами вищої освіти на кафедрах фармацевтичної хімії, медичної хімії, біохімії, фармакології та фармакоінформатики.

Головна мета полягає в освоєнні теоретичної бази методів комп'ютерного молекулярного моделювання потенційних АФІ з метою його застосування для оптимізації експериментального пошуку нових активних фармацевтичних інгредієнтів. З основної мети логічно вимальовуються практичні цілі опанування дисципліни "Молекулярний дизайн потенційних АФІ", а саме - підготовка здобувачів вищої освіти до науково-дослідної діяльності, пов'язаної із створенням лікарських засобів в академічних установах та промислових підприємствах, у першу чергу, з використанням засобів хемо - та біоінформатики, молекулярного моделювання. Як результат освоєння даної дисципліни мають бути сформовані уявлення про те, яким чином відбувається дизайн лікарських препаратів, які ідеї лежать в основі технології створення нових препаратів, які вимоги висуваються до сучасних лікарських препаратів, які теоретичні підходи і використовуються для створення нових лікарських препаратів, який типовий алгоритм віртуального скринінгу при створенні лікарських препаратів.

Основними завданнями навчальної дисципліни є розкриття ролі комп'ютерного молекулярного моделювання потенційних АФІ для пошуку нових активних фармацевтичних інгредієнтів; його значення для сучасної медичної хімії та фармакології; формування у студентів знань і умінь, що дозволяють прогнозувати на основі структури перспективні види біологічної активності, токсичності та параметрів біодоступності; розгляд та освоєння основних типів, прийомів, методів та областей застосування програмного забезпечення, що використовується в комп'ютерному молекулярному моделюванні потенційних АФІ.

## ПСИХОЛОГО-ПЕДАГОГІЧНІ РЕКОМЕНДАЦІЇ ДЛЯ ПІДГОТОВКИ ЗДОБУВАЧІВ ВИЩОЇ ОСВІТИ ДО ПІДСУМКОВОГО МОДУЛЬНОГО КОНТРОЛЮ

- При підготовці до підсумкового модульного контролю (ПМК) необхідно спиратися на лекції і рекомендовану літературу.
- Спочатку слід переглянути весь матеріал по здаваній дисципліні, відзначити для себе важкі питання. Обов'язково в них розібратися.
- На закінчення ще раз доцільно повторити основні положення досліджуваного матеріалу.
- Кожний білет ПМК містить **9 питань** та пошуково-практичну задачу (9 запитань, **7 з яких є тестовими**, 1 – теоретичним і 1 – практично орієнтованим).

Враховуючи, що кількість тестових питань є переважним в структурі білетів ПМК, то здобувачам вищої освіти слід уважно ознайомитися з наступними рекомендаціями:

- При підготовці до виконання тестових завдань насамперед слід уважно вивчити структуру тесту, оцінити обсяг часу, що виділяється на виконання всього модульного контролю, побачити, якого типу завдання в ньому містяться. Це допоможе налаштуватися на роботу.
- Краще починати відповідати на ті питання, в правильності рішення яких немає сумнівів, і не зупинятися на тих, які можуть викликати довгі роздуми. Це дозволить заспокоїтися і зосередитися на виконанні більш складних питань.
- Дуже важливо завжди уважно читати завдання до кінця, не намагаючись зрозуміти умови "за першими словами" або виконавши

подібні завдання в попередніх тестуваннях. Такий поспіх зазвичай призводить до прикрих помилок в найлегших питаннях. Якщо ви не знаєте відповіді на запитання або не впевнені в правильності, слід пропустити його і відзначити, щоб потім до нього повернутися.

- Сучасна психологія радить думати тільки про поточне завдання.
- Як правило, завдання в тестах не пов'язані одне з одним безпосередньо, тому необхідно концентруватися на даному питанні і знаходити рішення, які підходять саме до нього. Крім того, виконання цієї рекомендації дасть ще один психологічний ефект - дозволить забути про невдачу у відповіді на попереднє запитання, якщо така мала місце.
- Розраховувати виконання завдань потрібно завжди так, щоб залишився час на перевірку і доопрацювання (приблизно  $1/3-1/4$  запланованого часу). Тоді ймовірність опіски зводиться до нуля і є час, щоб набрати максимум балів на легких завданнях і зосередитися на вирішенні більш складних, які спочатку довелося пропустити.
- У складі тесту можуть зустрічатися як питання з одним правильним варіантом відповіді, так і з кількома.

**ПЕРЕЛІК ТЕОРЕТИЧНИХ ПИТАНЬ ДЛЯ ПІДГОТОВКИ  
ЗДОБУВАЧІВ ВИЩОЇ ОСВІТИ ДО ПІДСУМКОВОГО  
МОДУЛЬНОГО КОНТРОЛЮ**

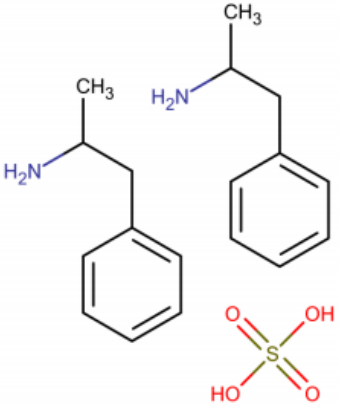
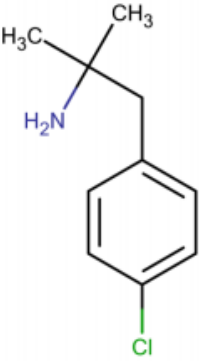
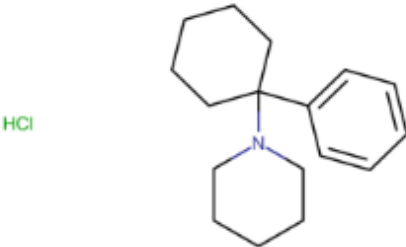
1. Подання молекул.
2. Типові уявлення молекул в хімії (структурна формула, хімічна формула, тривіальне ім'я).
3. Особливості подання в хемоінформатиці, вимоги до уявленням. Види уявлень.
4. Лінійні уявлення (імена, WLN, SMILES, SLN, InChI).
5. Подання молекулярних графів.
6. Бітові рядки (структурні ключі, відбитки пальців, хешировані відбитки пальців).
7. Матричне подання, види матриць.
8. Табличне подання.
9. Тривимірні подання. Координати атомів.
10. Поверхні. Види поверхонь.
11. Структури Маркуша.
12. Типові формати файлів (MDL, Sybyl, PDB)
13. Структура баз даних. Види пошуку хімічних базах даних.
14. Пошук за структурою, підструктурою, суперструктурою і за молекулярною подібністю в базах даних різних типів.
15. Основні хімічні бази даних в хемоінформатиці
16. Фармакофори.
17. Фармакофорний пошук.
18. Визначення і використання дескрипторів.
19. Роль дескрипторів в хемоінформатиці. Різноманіття дескрипторів.
20. Класифікація дескрипторів по функціональності.
21. Фізико-хімічні дескриптори.

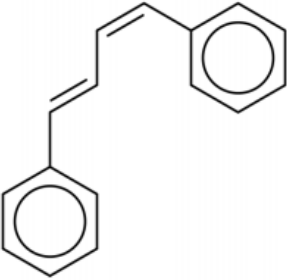


22. Топологічні індекси.
23. Тривимірні дескриптори.
24. Фрагментні дескриптори.
25. Фармакофорні дескриптори.
26. Константи замісників.
27. Квантово-хімічні дескриптори.
28. Дескриптори молекулярних полів.
29. Дескриптори молекулярної подібності.
30. Історія моделювання "структура-властивість" SAR/QSAR/QSPR
31. Побудова та валідація моделей
32. Класичний QSAR (методи Ганча, Фрі-Вільсона). SAR/QSAR/QSPR на дескрипторах.
33. 3D QSAR моделювання.
34. Стандартний метод CoMFA
35. Топомерний метод CoMFA
36. Метод CoMSIA
37. Віртуальний скринінг. Характеристика структурного методу і методу, що заснований на використанні білкових мішеней.
38. Визначення хітів, оптимізація «структур-лідерів».
39. Застосування методів молекулярного докінгу та молекулярної динаміки у віртуальному скринінгу.
40. *In silico* оцінка можливих метаболічних шляхів біотрансформації потенційних АФІ. Структурні алерти та їх використання для оцінки токсичності і канцерогенності «структур-лідерів».

## ПРИКЛАДИ ЗАВДАНЬ ДЛЯ ПІДГОТОВКИ ДО ПІДСУМКОВОГО МОДУЛЬНОГО КОНТРОЛЮ

I. Для представлених в таблиці структур підготуйте SMILES. Завдання з секретом: для однієї із структур потрібно вказати ізомерний SMILES.

№	Структура	SMILES
1		
2		
3		

4		
---	---	--

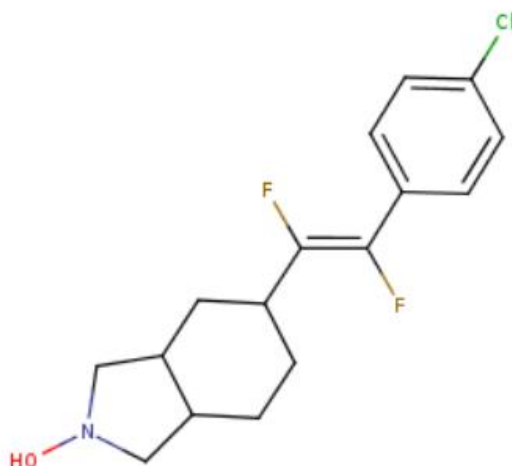
II. На підставі поданих в таблиці SMILES наведіть відповідні структури

№	SMILES	Структура
1	<chem>CN1C2CCC1C(C(C2)O)C(=O)O</chem>	
2	<chem>CC/C=C/C</chem>	
3	<chem>COC(=O)N1CCOC(C1C)C1=CC=CC=C1</chem>	

4	[cH-]1cccc1	

III. Оберіть правильну відповідь.

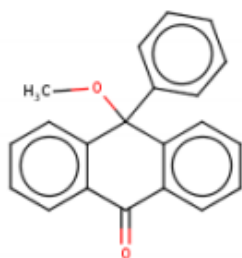
1. Який з перерахованих SMILES відповідає наведеній структурі?



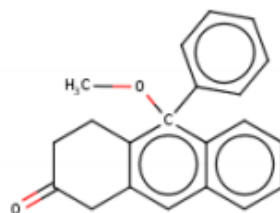
- 1) C1(CC2)CN(O)CC1CC2/C(F)C(F)/c3ccc(Cl)cc3
- 2) C1(CC2)CN(O)CC1CC2/C(F)=C(F)/c3ccc(Cl)cc3
- 3) C1(CC2)CN(O)CC1CC2C\F)C(F)/c3ccc(Cl)cc3
- 4) F\C(C1(CC2)CN(O)CC1CC2)=C(c3ccc(Cl)cc3)\F

2. Яка з наведених структур відповідає даним SMILES?

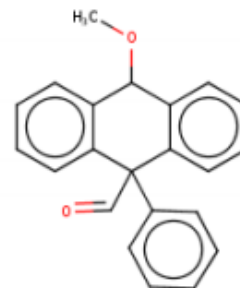
c1cccc(c1C(=O)c3c4)C(c2ccccc2)(OC)c3ccc4



1)

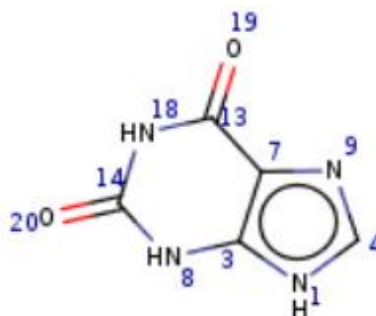
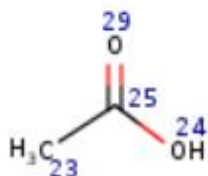


2)



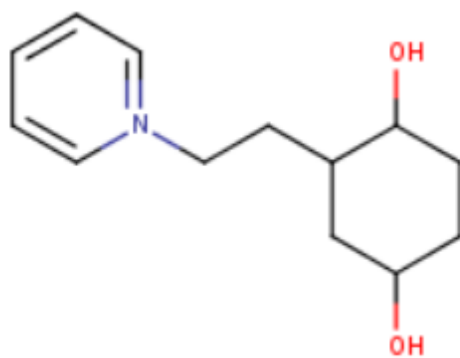
3)

3. Який з перерахованих SMILES відповідає зображенню, що наведене нижче?



- 1) CC(=O)O.c12C(=O)NC(=O)Nc1ncn2
- 2) CC(=O)O.C12C(=O)NC(=O)Nc1ncn2
- 3) OC(=C)O.C12C(=O)NC(=O)Nc1ncn2
- 4) CC(=O)O.c12c(=O)nc(=O)nC1NCN2

**IV.** З використанням класичного алгоритму Моргана (з урахуванням ступенів вершин) проведіть нумерацію атомів (атомами водню і типом атомів можна знехтувати). Підготуйте «канонічну» (на підставі проведеної нумерації) назву SMILES (зверніть увагу, з якого номера назва починає генеруватися, при розгалуженні який атом вибирається).



## ПРИКЛАД БІЛЕТУ

МІНІСТЕРСТВО ОХОРОНИ ЗДОРОВ'Я УКРАЇНИ  
НАЦІОНАЛЬНИЙ ФАРМАЦЕВТИЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ

Ф А 2.5-25-282

Рівень вищої освіти третій освітньо-науковий магістерський рівень вищої освіти  
(назва рівня вищої освіти)

Галузь знань 22 Охорона здоров'я  
(шифр і назва галузі знань)

Спеціальність 226 Фармація, промислова фармація ФPhD Семестр (4,0д; 4,0в; 4,0з)  
(код і найменування спеціальності)

Освітня програма Фармація  
(найменування освітньої програми)

Навчальна дисципліна «Молекулярний дизайн потенційних АФІ»  
(назва навчальної дисципліни)

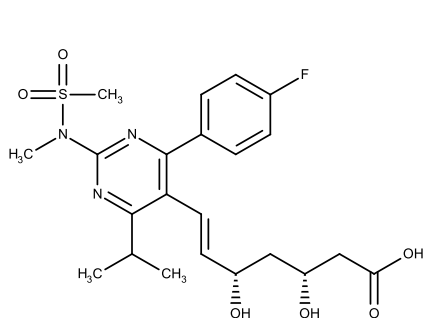
### КОНТРОЛЬ ПІДСУМКОВОГО МОДУЛЯ «Молекулярний дизайн потенційних АФІ»

## ТИПОВИЙ БІЛЕТ

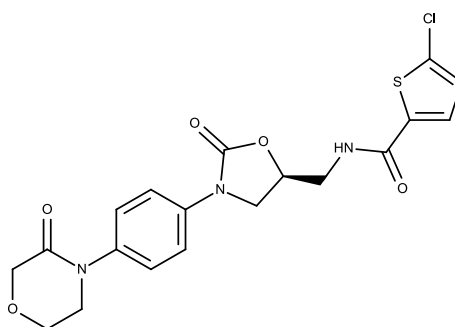
1. Охарактеризуйте лінійне подання SMILES та поясніть правила їх побудови. Подання стереоізомерів, таутомерів, ароматичних структур за допомогою SMILES

2. Наведіть топологічні фармакофори зазначених нижче молекул з позначеннями:

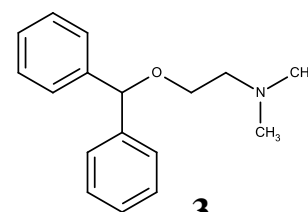
**L**-гідрофобний фрагмент, **D** - H-донор, **A** - H-акцептор, **R** - ароматичний фрагмент



Rosuvastatin



Rivaroxaban



Diphenhydramine

3. Які із зазначених SMILES відповідають молекулі ацетамінофену (парацетамолу)?

- A. CC(=O)NC1=CC=C(O)C=C1
- B. CCN(CC)CCOC(=O)C1=CC=C(N)C=C1
- C. OC(=O)c(cccc1)c1OC(=O)C
- D. OC(=O)C1=CC=CC=C1

4. Які InChI відповідають молекулі кофеїну і є стандартними?

A. InChI=1S/C8H10N4O2/c1-10-4-9-6-5(10)7(13)12(3)8(14)11(6)2/h4H,1-3H3

B. InChI=1S/C5H5N5O/c6-5-9-3-2(4(11)10-5)7-1-8-3/h1H,(H4,6,7,8,9,10,11)

C. InChI=1S/C8H10N3O2/c1-10-4-9-6-5(10)7(13)12(3)8(14)11(6)2/h4H,1-3H3

D. InChI=1/C5H5N5O/c6-5-9-3-2(4(11)10-5)7-1-8-3/h1H,(H4,6,7,8,9,10,11)/f/h7,9H,6H2

5. В якій з наведених баз даних можна знайти інформацію, що характеризує міцність зв'язування хімічної сполуки з білками?

A. PDB

B. AIST

C. CAS

D. ZINC

6. Яку інформацію про сполуку можна знайти в базі ChemSpider?

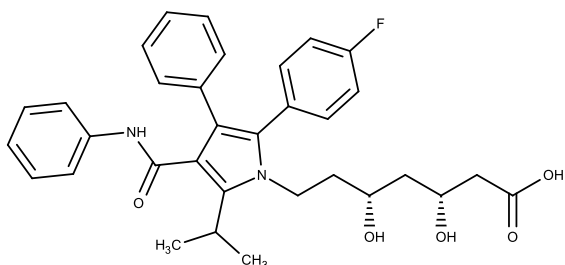
A. Хімічна структура

B. Інформація про біологічні випробування даної сполуки

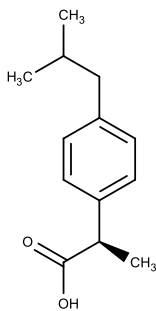
C. Кристалічна структура молекули

D. Індекс LASSO, що характеризує здатність молекули до зв'язування з активними центрами різних ферментів

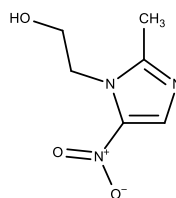
7. Яка з представлених структур лікарських препаратів не відповідає «правилу Ліпінського 5»?



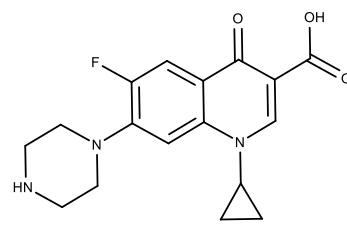
A



B



C



D

A. Аторвастатин ( $C_{33}H_{35}FN_2O_5$ )

B. Ібупрофен ( $C_{13}H_{18}O_2$ )



C. Метронідазол ( $C_6H_9N_3O_3$ )

D. Ципрофлоксацин ( $C_{17}H_{18}FN_3O_3$ )

8. Дві структури задаються наведеними нижче бітовими рядками. Якою буде індекс схожості Танімото між даними структурами?

Mol 1 1 0 0 0 1 1 1 0 1 1

Mol 2 0 1 0 0 1 0 1 1 0 1

A. 6/11

B. 5/8

C. 3/10

D. 3/8

9. Які етапи входять у процес здійснення пошуку за структурою в хімічних базах даних?

A. Стандартизація сполуки

B. Генерація хеш-коду

C. Розрахунок дескриптора TPSA

D. Пошук індексу подібності даної сполуки з іншими сполуками бази

### Практична частина

З використанням бази *ChemBL* і хемоінформаційного пакету *ChemAxon* зробіть вибірку сполук інгібіторів циклооксигенази-2 (COX-2). Проведіть стандартизацію структур. Розрахуйте необхідну кількість дескрипторів і побудуйте кілька QSAR моделей (не менше 5). З метою валідації моделі використовуйте 5-кратну крос-валідацію і зовнішній валідуючий набір. Відберіть кращу модель та зробіть висновок щодо її придатності до використання на інших етапах віртуального скринінгу.

Затверджено на засіданні кафедри медичної хімії

Протокол № 1 від 20 серпня 2020 року

Завідувач кафедри, проф.

  
(підпис)

Перехода Л.О.

## **КРИТЕРІЇ ОЦІНЮВАННЯ ПІДСУМКОВОГО МОДУЛЬНОГО КОНТРОЛЮ**

### **«Молекулярний дизайн потенційних АФІ»:**

#### **Завдання 1:**

6,0 балів - відповідь повна і правильна, показано вільне володіння матеріалом і вміння застосовувати на практиці теоретичні знання.

3,0 бала - відповідь неповна, висвітлено основні базові принципи питання, але присутні помилки в інтегративному розумінні суті завдання.

#### **Завдання 2:**

6,0 бали - відповідь повна і правильна, наведено відповідне рішення ситуаційної задачі з відповідним поясненням і застосуванням оптимального алгоритму.

3,0 бала - відповідь неповна, але правильна в базовому принципі, не застосовано оптимальний алгоритм розв'язання ситуаційної задачі і/або не дано відповідного пояснення.

#### **Завдання 3-8:**

Тестові. Правильна відповідь на кожен тест оцінюється в 1,0 бал.

#### **Практична частина:**

24,0 бали - завдання виконане правильно, з повним розумінням суті пошуку і здатністю вербально коментувати вироблені операції, з умілим використанням програмного забезпечення, а також умінням вибудовувати логіко-структурні висновки на підставі отриманих результатів.

12,0 балів - завдання виконане правильно, але використовувався неоптимальний алгоритм пошуку, не збудовані логіко-структурні висновки на підставі отриманих результатів.

6,0 балів - відповідь неповна, але завдання виконано більше, ніж на половину.

**Шкала оцінювання: національна та ECTS**

Сума балів за всі види навчальної діяльності	Оцінка ECTS	Оцінка за національною шкалою	
		для екзамену, курсового проекту (роботи), практики	для заліку
90 – 100	<b>A</b>	відмінно	зараховано
82-89	<b>B</b>	добре	
74-81	<b>C</b>		
64-73	<b>D</b>	задовільно	
60-63	<b>E</b>		
35-59	<b>FX</b>	незадовільно з можливістю повторного складання	не зараховано з можливістю повторного складання
0-34	<b>F</b>	незадовільно з обов'язковим повторним вивченням дисципліни	не зараховано з обов'язковим повторним вивченням дисципліни

## ПЕРЕЛІК ОСНОВНИХ ДЖЕРЕЛ ЛІТЕРАТУРИ ДЛЯ ПІДГОТОВКИ ДО ПІДСУМКОВОГО МОДУЛЬНОГО КОНТРОЛЮ

### *Базова*

1. Andreas Bender Jean-Loup Faulon. Handbook of Chemoinformatics Algorithms. Taylor & Francis, June 29, 2010. 454 pp.
2. Beatriz Scaglia. The Fundamentals: An Understanding of Cheminformatics. BiblioBazaar, 2011. 140 pp.
3. J. Gasteiger. Handbook of Cheminformatics: From Data to Knowledge in 4 Volumes. Wiley-VCH, 2003. 1870 pp.
4. Riccardo Baron. Computational Drug Discovery and Design. Humana Press, 2011. 628 pp.
5. Shayne Cox Gad. Development of Therapeutic Agents Handbook. J. Wiley & Sons, 2011. 1232 pp.
6. Введение в хемоинформатику: Химические базы данных / Т. И. Маджидов, И. И. Баскин, И. С. Антипин, А. А. Варнек.- Казань: [Казанский университет], 2015.- 185 с.

### *Допоміжна*

1. Shayne Cox Gad. Drug Discovery Handbook. John Wiley & Sons, July 8, 2005. 1000 pp.
2. Thomas Engel Johann Gasteiger, ed. Cheminformatics: A Textbook. 2003. isbn: 978-3527306817.
3. Andreas Bender Rajarshi Guha. Computational Approaches in Cheminformatics and Bioinformatics. Wiley, 2011. 288 pp
4. Gaikwad V.J. Application of cheminformatics for innovative drug discovery / V.J. Gaikwad // Int. J. Chem. Sci. Appl. -2010. -Vol 1, Iss. 1. -P. 16-24.
5. А. Туровський. Комп'ютерна структурна хімія: навчальний посібник / М.А. Туровський, О.М. Пастернак. -Донецьк, : ДонНУ, 2009. -153 с.

## ПЕРЕЛІК РЕСУРСІВ ІНФОРМАЦІЙНО-ТЕЛЕКОМУНІКАЦІЙНОЇ МЕРЕЖІ "ІНТЕРНЕТ", НЕОБХІДНИХ ДЛЯ ПІДГОТОВКИ ДО ПІДСУМКОВОГО МОДУЛЬНОГО КОНТРОЛЮ

### *Базові*

Journal of Cheminformatics - <http://jcheminf.springeropen.com/>

Virtual Computational Chemistry Laboratory - <http://www.vcclab.org/>

База даних ChEMBL - <https://www.ebi.ac.uk/chembl>

База даних Sure ChEMBL - <https://www.surechembl.org/>

База даних ChemSpider - <http://www.chemspider.com>

База даних PubChem - <http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/>

База даних ZINC - <http://zinc.docking.org>

Програми Chemaxon - <https://chemaxon.com/>

### *Допоміжні*

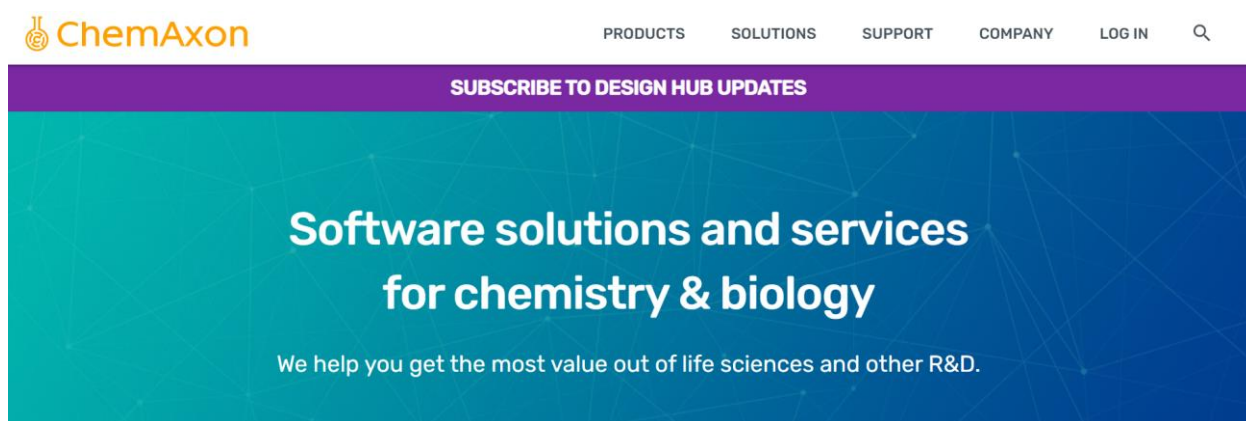
<http://www.scopus.com> – База даних наукових публікацій

[https://chm.kode-solutions.net/products\\_dragon.php](https://chm.kode-solutions.net/products_dragon.php) - програма розрахунку  
молекулярних дескрипторів

<http://bigchem.eu/> - Інформаційний ресурс

<http://www.click2drug.org/> - Довідник комп'ютеризованих інструментів  
розробки лікарських препаратів

Для підготовки до підсумкового модульного контролю дисципліни «Молекулярний дизайн потенційних АФІ» здобувачам вищої освіти потрібно встановити програмне забезпечення хемоінформаційної платформи ChemAxon <https://chemaxon.com/>



Файли інсталяції доступні для скачування з сайту:

- **MarvinSketch** - <https://chemaxon.com/products/marvin>
- **JChem for Office** - <https://chemaxon.com/products/jchem-for-office>
- **Instant JChem** - <https://chemaxon.com/products/instant-jchem>

Установка ліцензії.

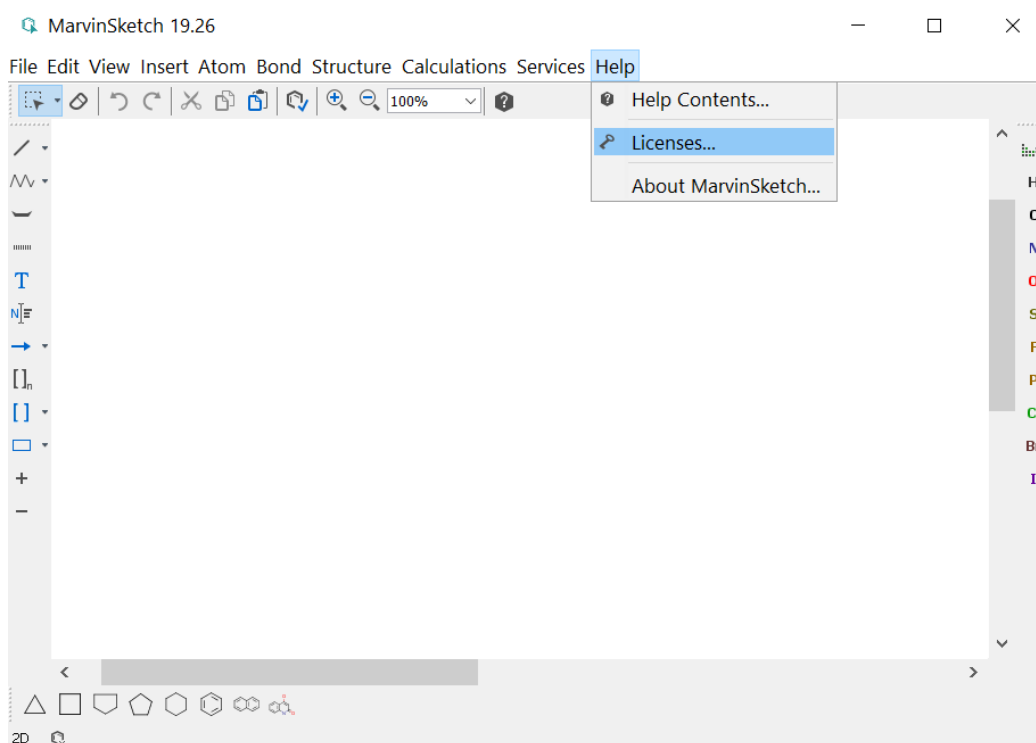
- Для роботи з JChem for Office, InstantJChem і використанні розширених функцій MarvinSketch потрібно встановити ліцензію.

### Варіант 1.

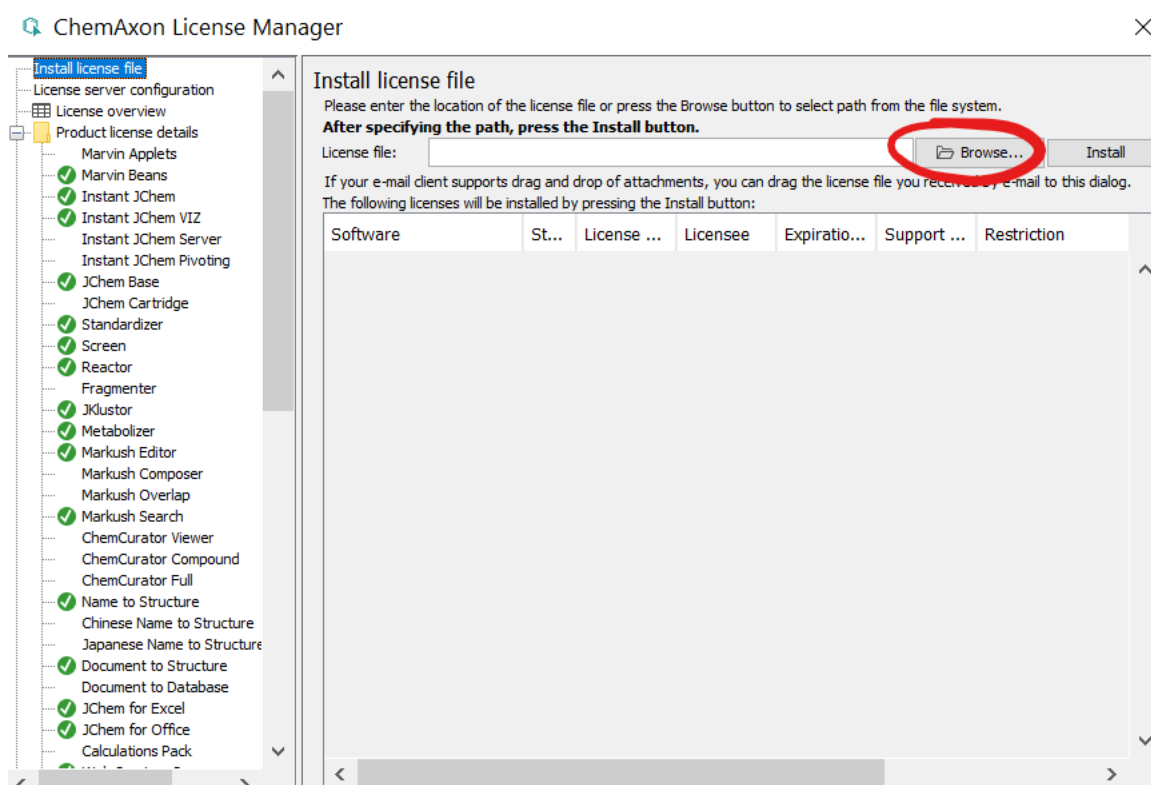
☞ Отримайте освітню ліцензію у викладача, для чого напишіть викладачеві на форумі відповідної теми.

☞ Після чого запустіть **MarvinSketch**.

☞ Натисніть *Help - Licenses*

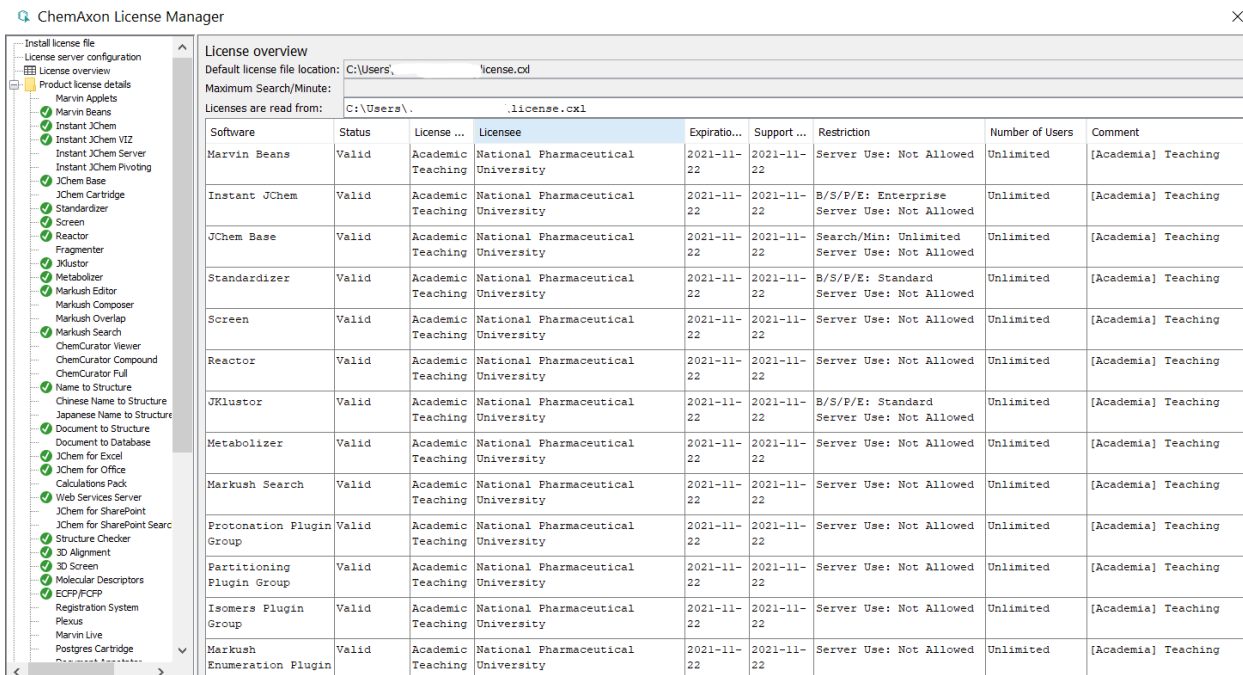


☞ У вікні *License Manager* натисніть *Browse* виберіть розташування файлу ліцензії - *Open*



☞ Натисніть *Install*

☞ Після установки ліцензії вікно буде виглядати наступним чином:



The screenshot shows the ChemAxon License Manager interface. On the left is a tree view of installed software components, many with green checkmarks. The main area displays a 'License overview' table with the following data:

Software	Status	License ...	Licensee	Expiratio...	Support ...	Restriction	Number of Users	Comment
Marvin Beans	Valid	Academic Teaching	National Pharmaceutical University	2021-11-22	2021-11-22	Server Use: Not Allowed	Unlimited	[Academia] Teaching
Instant JChem	Valid	Academic Teaching	National Pharmaceutical University	2021-11-22	2021-11-22	B/S/P/E: Enterprise Server Use: Not Allowed	Unlimited	[Academia] Teaching
JChem Base	Valid	Academic Teaching	National Pharmaceutical University	2021-11-22	2021-11-22	Search/Min: Unlimited Server Use: Not Allowed	Unlimited	[Academia] Teaching
Standardizer	Valid	Academic Teaching	National Pharmaceutical University	2021-11-22	2021-11-22	B/S/P/E: Standard Server Use: Not Allowed	Unlimited	[Academia] Teaching
Screen	Valid	Academic Teaching	National Pharmaceutical University	2021-11-22	2021-11-22	Server Use: Not Allowed	Unlimited	[Academia] Teaching
Reactor	Valid	Academic Teaching	National Pharmaceutical University	2021-11-22	2021-11-22	Server Use: Not Allowed	Unlimited	[Academia] Teaching
JKlustor	Valid	Academic Teaching	National Pharmaceutical University	2021-11-22	2021-11-22	B/S/P/E: Standard Server Use: Not Allowed	Unlimited	[Academia] Teaching
Metabolizer	Valid	Academic Teaching	National Pharmaceutical University	2021-11-22	2021-11-22	Server Use: Not Allowed	Unlimited	[Academia] Teaching
Markush Search	Valid	Academic Teaching	National Pharmaceutical University	2021-11-22	2021-11-22	Server Use: Not Allowed	Unlimited	[Academia] Teaching
Protonation Plugin Group	Valid	Academic Teaching	National Pharmaceutical University	2021-11-22	2021-11-22	Server Use: Not Allowed	Unlimited	[Academia] Teaching
Partitioning Plugin Group	Valid	Academic Teaching	National Pharmaceutical University	2021-11-22	2021-11-22	Server Use: Not Allowed	Unlimited	[Academia] Teaching
Isomers Plugin Group	Valid	Academic Teaching	National Pharmaceutical University	2021-11-22	2021-11-22	Server Use: Not Allowed	Unlimited	[Academia] Teaching
Markush Enumeration Plugin	Valid	Academic Teaching	National Pharmaceutical University	2021-11-22	2021-11-22	Server Use: Not Allowed	Unlimited	[Academia] Teaching

☞ Після закриття вікна *License Manager* можна використовувати програмне забезпечення хемоінформаційної платформи ChemAxon у звичайному режимі.

## Варіант 2.

При бажанні, можна безкоштовно отримати індивідуальну ліцензію для освітніх або дослідницьких цілей - Teaching Academic License або Academic Research License. Про вимоги та особливості ліцензій див. інформацію за посиланням <https://chemaxon.com/academic-license>. При запиті ліцензії особливу увагу зверніть на полі форми My academic e-mail –це обов'язково повинен бути університетський e-mail. А також на полі Purpose – від заповнення цього поля залежить, чи дадуть вам ліцензію (постарайтеся добре розписати, цілі повинні відповідати тому, яку ліцензію ви запитуєте).