

УДК 004.414

https://doi.org/10.33619/2414-2948/67/18

МОБИЛЬНОЕ ПРИЛОЖЕНИЕ ДЛЯ УЧЕТА РЕЗУЛЬТАТОВ ЛАБОРАТОРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ ХИМИКА-СИНТЕТИКА

©*Дмитриева Ю. А.*, ORCID: 0000-0003-0475-3387, Поволжский государственный университет телекоммуникаций и информатики, г. Самара, Россия, julia.istomina2010@yandex.ru

MOBILE APPLICATION FOR RECORDING THE RESULTS OF LABORATORY RESEARCH OF A SYNTHETIC CHEMIST

©*Dmitrieva Yu.*, ORCID: 0000-0003-0475-3387, Povolzhskiy State University of Telecommunications and Informatics, Samara, Russia, julia.istomina2010@yandex.ru

Аннотация. В данной статье рассматривается приложение для мобильных устройств с операционной системой Android, позволяющее фиксировать результаты лабораторных исследований химика-синтетика. Представлен обзор базовых функциональных возможностей мобильного приложения «Заметки Химика».

Abstract. This article discusses an application for mobile devices with the Android operating system that allows you to record the results of laboratory research of a synthetic chemist. An overview of the basic functionality of the Chemical Notes mobile application is presented.

Ключевые слова: система учета результатов исследований, мобильное приложение, лабораторный журнал, органический синтез, электронная лабораторная записная книжка.

Keywords: research accounting systems, mobile application, laboratory journal, organic synthesis, electronic laboratory notebook.

Ведение лабораторного журнала — неотъемлемая и важная часть в исследовательской работе. Лабораторный журнал или лабораторная записная книжка химика-синтетика — это рукописный текст со схемами синтеза и условиями проведения реакций, химическими расчетами, выходами продуктов реакций, аналитическими и другими данными. Переход к электронному способу ведения такого журнала позволяет улучшить качество фиксации и сохранения данных, облегчить обмен информацией и воспроизводимость экспериментов, сократить или полностью устранить необходимость по переписыванию текстов, уменьшая риск неправильного размещения или потери данных. За последние годы разработано достаточное количество электронных лабораторных записных книжек, предлагающих интеллектуальные решения для документирования лабораторных данных, среди них Labstep, LabArchives, Labfolder, Benchling, Mbook, sciNote, RSpace, eLabJournal, Signals Notebook и другие [1]. Однако не все руководители лабораторий имеют реальные возможности покупки и применения таких электронных лабораторных журналов, а также обеспечения каждого сотрудника отдельным рабочим местом с персональным компьютером. Большинство электронных лабораторных журналов, предлагаемых на рынке информационных услуг, имеет широкий спектр возможностей и вместе с тем слишком сложный интерфейс. Для освоения таких приложений требуются дополнительные затраты на специализированные курсы

обучения. Кроме того, предлагаемый арсенал функциональных возможностей рассчитан на крупные организации и лаборатории в разных сферах деятельности, многие функции остаются невостребованными индивидуальными пользователями. В связи с этим возникает необходимость в создании бюджетного мобильного приложения для регистрации результатов исследований химика-синтетика под популярную операционную систему Android, которое бы свободно устанавливалось из магазина приложений и имело интуитивно понятный пользовательский интерфейс. Мобильное приложение, в отличие от десктопного, имеет доступ к памяти устройства и удобно тем, что необходимая информация всегда под рукой. По сравнению с веб-приложением мобильное приложение не зависит от сети, за исключением некоторых случаев, когда, например, для пользования некоторыми возможностями приложения необходим Интернет.

Результаты и обсуждение

Приложение «Заметки Химика» разработано для операционной системы Android (версия Marshmallow и более поздние).

Для разработки мобильного приложения использовались следующие основные средства: язык программирования Kotlin 1.4.32, язык свободного описания структур элементов XML и интегрированная среда разработки Android Studio 4.2.1. Мобильное приложение работает в автономном режиме (без подключения к сети Интернет). Интерфейс приложения представлен на русском языке и выполнен в соответствии с принципами Material Design (<https://material.io/>).

Персональное мобильное приложение «Заметки Химика» разработано для учета результатов лабораторных исследований химика-синтетика и реализует следующие функции:

- фиксация информации по подготовке, проведению химического синтеза, выделению, очистке и анализу продуктов реакции;
- автоматический расчет массы и объема соединений, необходимых для проведения химической реакции, на основе их химической количеств;
- возможность добавления комментариев о ходе протекания химической реакции с указанием даты и времени;

Возможность добавления заметок, составления списков дел, фиксации идей.

После установки приложения, на экране мобильного устройства появляется ярлык с надписью: «Заметки Химика». При запуске мобильного приложения пользователь видит два основных раздела: «Синтезы» и «Заметки» (Рисунок 1).

В разделе «Синтезы» хранится список проведенных и планируемых к проведению химических реакций. В нем представлено наименование, изображение схемы синтеза и краткое представление методики. Интерфейс программы позволяет добавлять в список синтезов новые при нажатии на кнопку «+» в правом нижнем углу экрана.

Раздел «Заметки» позволяет фиксировать в виде текста свои химические идеи, сиюминутные мысли, план работы на ближайшее время, напоминание о том, что необходимо сделать и др.

В приложении «Заметки Химика» при редактировании или добавлении новой карточки с химической реакцией вся необходимая для проведения синтеза информация распределена по четырем вкладкам. Как правило, работа химика-синтетика начинается с выбора оптимального метода синтеза целевого соединения из коммерчески доступных исходных соединений. В разделе «Описание» есть возможность записать название синтеза, загрузить

изображение со схемой химической реакции, скопировать и вставить текст с методикой проведения химической реакции (Рисунок 2).

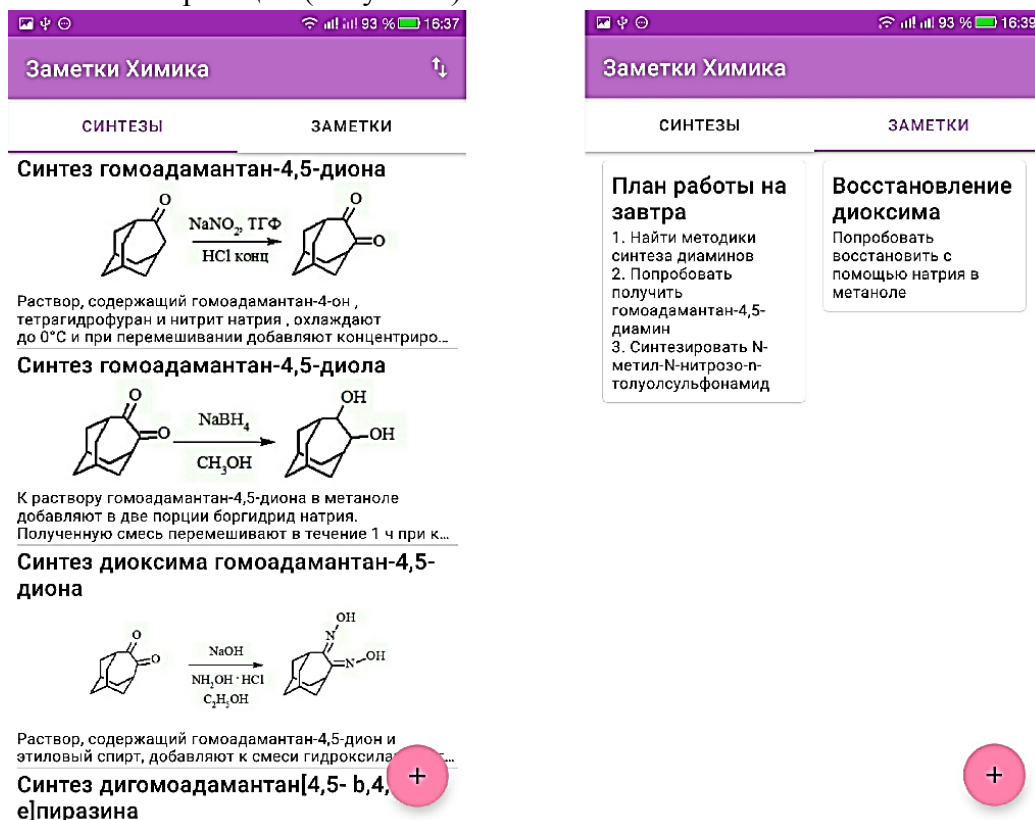


Рисунок 1. Интерфейс главного экрана, состоящего из двух разделов: «Синтезы» и «Заметки»

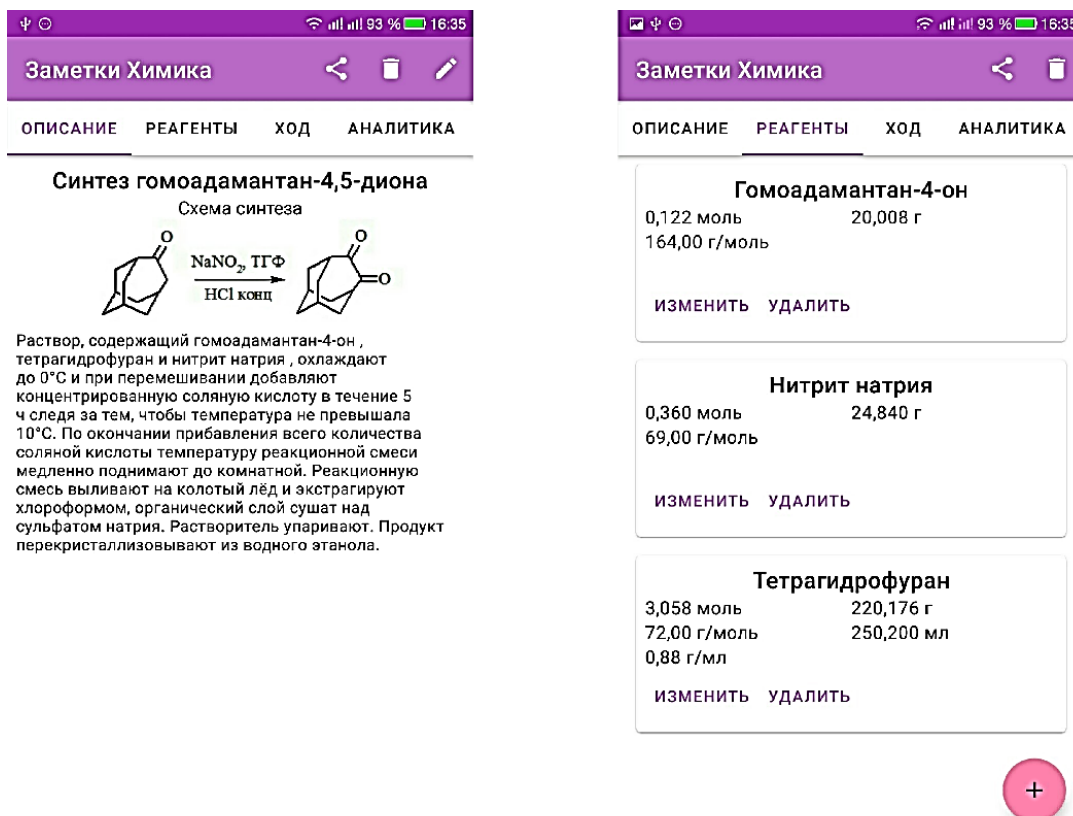


Рисунок 2. Интерфейс экрана с функцией добавления описания синтеза и расчета реагентов

Далее проводятся расчеты для определения количеств реагентов, которые будут использованы в процессе проведения химической реакции. Мобильное приложение поможет автоматически рассчитать массу и объем химических соединений, вступающих в реакцию, исходя из их химических количеств, что позволит исключить фактор человеческой ошибки на этапе расчета синтеза.

Следующий этап — непосредственно, синтез целевого соединения. Дата проведения реакции, порядок и скорость добавления реагентов, температура реакционной смеси — все эти особенности проведения реакции химик-синтетик, как правило, записывает в рабочий журнал. Теперь можно будет фиксировать их в мобильном приложении, перейдя к третьей вкладке — «Ход», где сохраняются все комментарии, добавляемые в ходе проведения химического синтеза, с указанием даты и времени (Рисунок 3). Здесь можно указать качество и способы очистки растворителей, температуру кипения при перегонке, время начала проведения химической реакции и добавления реагента, изменение цвета реакционной смеси, время удерживания продуктов реакции в условиях газожидкостной хроматографии, количество растворителя при экстракции, количество используемого при хроматографии элюента или силикагеля, коэффициента удерживания исходных соединений и продуктов реакции, время выдерживания над осушителем и многое другое, что может быть важно при повторном проведении эксперимента.

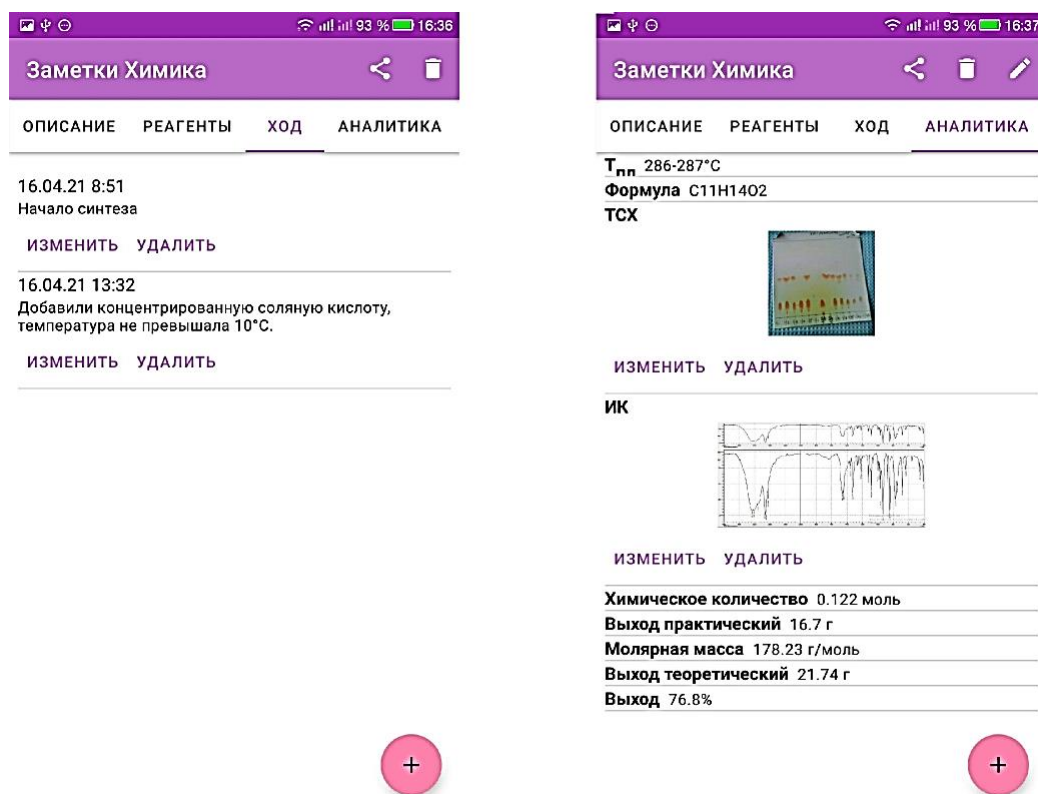


Рисунок 3. Интерфейс экрана с функцией добавления комментариев по ходу синтеза и аналитических данных по продуктам реакции

Наиболее сложным этапом работы химика-синтетика является процесс выделения продукта реакции, который заключается в отделении целевого соединения от растворителя, побочных продуктов реакции, оставшихся реагентов. Сначала реакционную смесь обрабатывают, экстрагируют и затем упаривают растворитель. Далее продукт очищают с

использованием следующий методов: кристаллизация, перегонка, хроматография. Очистка продукта от примесей исходных реагентов и побочных продуктов реакции необходима для идентификации полученного вещества — установления структуры синтезированного соединения и определение его характеристических констант, например, температуры плавления, которые являются также критериями чистоты. Структура нового соединения подтверждается с помощью физико-химических методов анализа: спектроскопия ядерного магнитного резонанса, инфракрасная и ультрафиолетовая спектроскопия, масс-спектрометрия и др.

На вкладке «Аналитика» раздела «Синтезы» хранится информация по продуктам реакции: температура плавления, молярная масса продукта реакции, химическое количество и практический выход продукта реакции, теоретический выход и массовая доля выхода продукта реакции от теоретически возможного.

В приложение автоматически рассчитывается молярная масса продукта реакции на основе его молекулярной формулы, теоретический выход и массовая доля выхода продукта реакции. В общем случае молярная масса сложных молекул, выраженная в г/моль, численно равна относительной молекулярной массе, которая, в свою очередь, рассчитывается как сумма относительных атомных масс всех химических элементов, входящих в состав данной молекулы. Теоретический выход рассчитывается на основе молярной массы (M) продукта реакции и его химического количества (n) по формуле:

$$m_{\text{теор.}}(z) = n(\text{моль}) \cdot M(z/\text{моль}).$$

Известно, что массовая доля выхода — это отношение массы полученного вещества ($m_{\text{практ.}}$) к теоретически возможной ($m_{\text{теор.}}$):

$$\omega(\%) = \frac{m_{\text{практ.}}(z)}{m_{\text{теор.}}(z)} \cdot 100\%.$$

Приложение «Заметки Химика» позволяет загружать из «Галереи» различные изображения: фотографии пластинки с результатами тонкослойной хроматографии, спектров ЯМР, результатов масс-спектрометрии и элементного анализа и др. В программе предусмотрена возможность отправки данных по синтезу с помощью файла с расширением .chn через сторонние приложения (почтовый клиент, социальные сети, сервисы облачного хранения файлов и др.). При загрузке выгруженного файла в разделе «Синтезы» добавляется запись с информацией о химической реакции, содержащейся в файле.

Таким образом, разработано простое, доступное и интуитивно понятное персональное мобильное приложение для учета результатов лабораторных исследований химика-синтетика. Отличительной особенностью данного мобильного приложения являются полнота и наглядность представления данных по конкретному синтезу наряду со строгим структурированием информации и ограничением количества разделов.

Заключение

Мобильное приложение «Заметки Химика» для мобильных устройств с операционной системой Android устраняет необходимость по переписыванию текстов, уменьшая риск неправильного размещения и потери данных, облегчает обмен информацией и воспроизводимость экспериментов. Приложение обеспечивает быстрый доступ к необходимым данным, позволяет оперативно регистрировать результаты лабораторных

исследований и собирать изображения с аналитическими данными на одной вкладке, экономя время для поиска их на компьютере, в интернете и заменяя практику распечатки данных, которые необходимо прилагать к бумажному журналу. Мобильное приложение «Заметки Химика» содержит описанные в данной статье функциональные возможности и на данном этапе разработки может использоваться для регистрации результатов исследований химика-синтетика. В дальнейшем функциональные возможности приложения будут расширяться.

Список литературы:

1. Rubacha M., Rattan A. K., Hosselet S. C. A review of electronic laboratory notebooks available in the market today // *JALA: Journal of the Association for Laboratory Automation*. 2011. V. 16. №1. P. 90-98. <https://doi.org/10.1016/j.jala.2009.01.002>

References:

1. Rubacha, M., Rattan, A. K., & Hosselet, S. C. (2011). A review of electronic laboratory notebooks available in the market today. *JALA: Journal of the Association for Laboratory Automation*, 16(1), 90-98. <https://doi.org/10.1016/j.jala.2009.01.002>

*Работа поступила
в редакцию 16.05.2021 г.*

*Принята к публикации
19.05.2021 г.*

Ссылка для цитирования:

Дмитриева Ю. А. Мобильное приложение для учета результатов лабораторных исследований химика-синтетика // Бюллетень науки и практики. 2021. Т. 7. №6. С. 129-134. <https://doi.org/10.33619/2414-2948/67/18>

Cite as (APA):

Dmitrieva, Yu. (2021). Mobile Application for Recording the Results of Laboratory Research of a Synthetic Chemist. *Bulletin of Science and Practice*, 7(6), 129-134. (in Russian). <https://doi.org/10.33619/2414-2948/67/18>