

โดยทั่วไป ถ้าเป็นสารเคมีที่รู้จักกันดีอยู่แล้ว เราไม่จำเป็นต้องวาดขึ้นเองจากศูนย์ สามารถนำเข้าข้อมูลโครงสร้างสารเคมีจากเว็บไซต์ที่เป็นฐานข้อมูลสาธารณะได้ จะประหยัดเวลา และถูกลิขสิทธิ์เช่นกัน ตัวอย่างเช่น ฐานข้อมูล PubChem ซึ่งดูแลโดย National Library of Medicine เช่นเดียวกับ PubMed ที่นิสิตเรียนมาแล้ว

**COVID-19 Information** Public health information (CDC) Research information (NIH) SARS-CoV-2 data (NCBI) Prevention and treatment information (HHS) Español X

**NIH** National Library of Medicine  
National Center for Biotechnology Information

**PubChem** About Blog Submit Contact

# Explore Chemistry

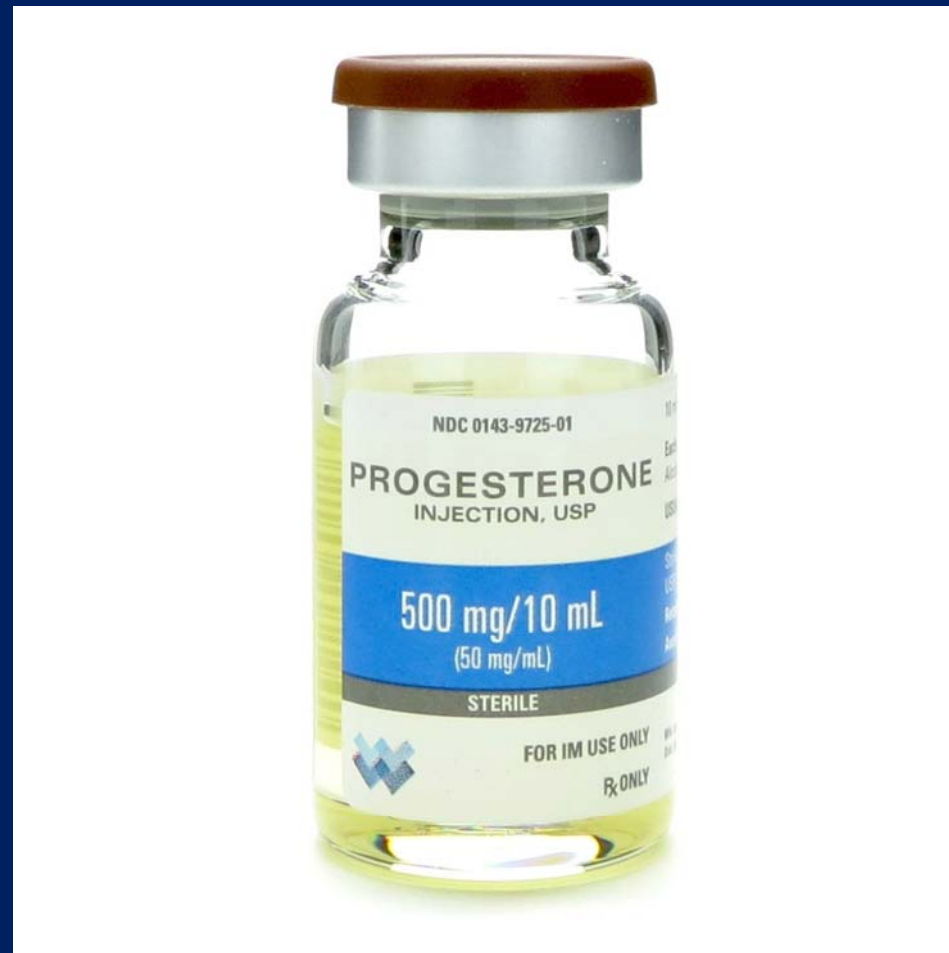
Quickly find chemical information from authoritative sources

Try covid-19 aspirin EGFR C9H8O4 57-27-2 C1=CC=C(C=C)C=O InChI=1S/C3H6O/c1-3(2)4/h1-2H3

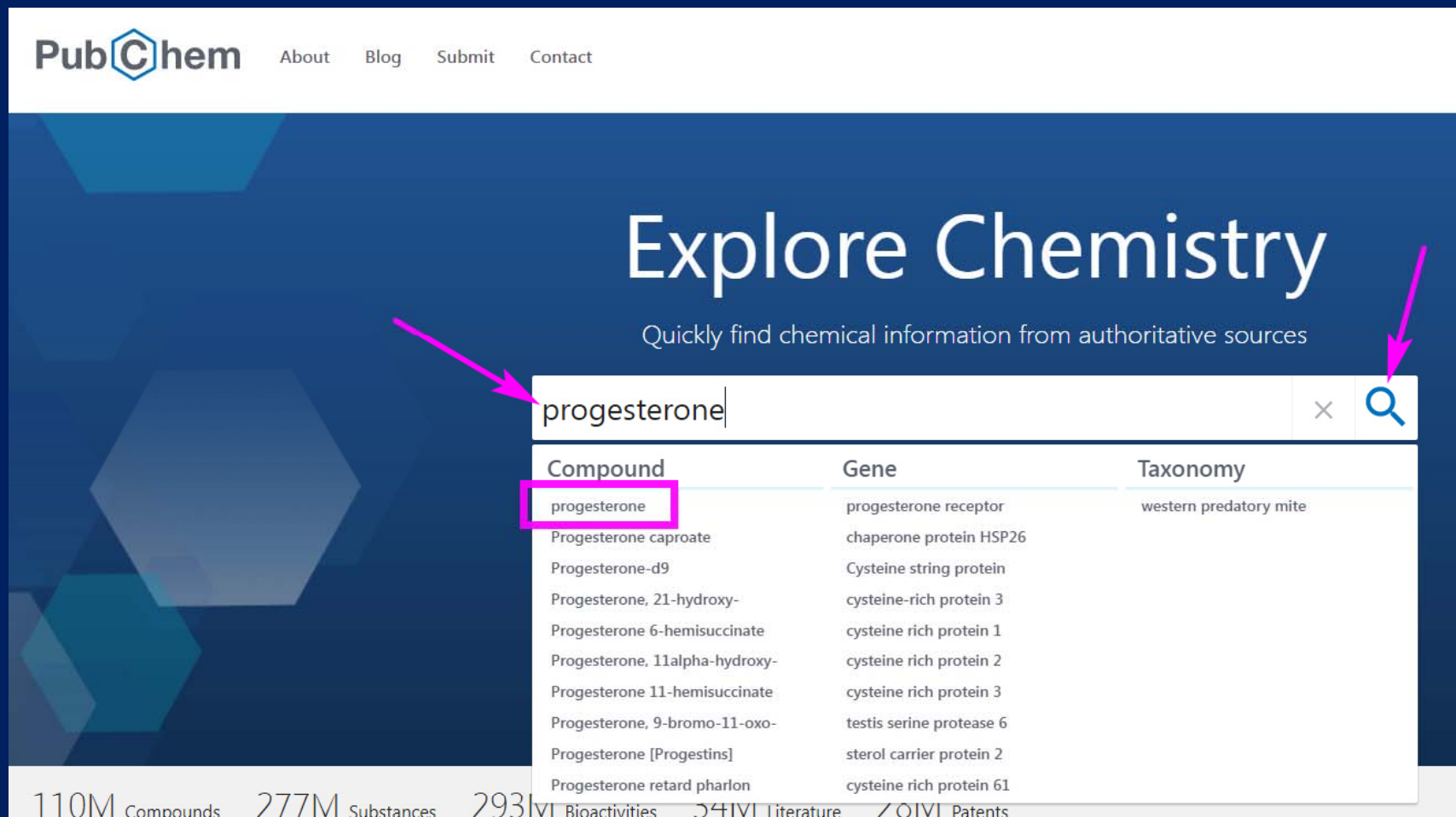
Use Entrez  Compounds  Substances  BioAssays

Draw Structure Upload ID List Browse Data Periodic Table

ตัวอย่างเช่น นิสิตอยากได้ภาพโครงสร้างของฮอร์โมนเพศ โปรเจสเตอโรน ก็เข้าเว็บ PubChem แล้วค้นด้วยคำว่า progesterone



พอเริ่มพิมพ์ progesterone ในช่องค้นหาของ PubChem จะมีคำที่ตรง คำใกล้เคียง  
ขึ้นมาให้อัตโนมัติ สะดวกมาก ไม่ต้องพิมพ์จนครบทั้งคำก็ได้ครับ



The screenshot shows the PubChem website interface. At the top left is the PubChem logo and navigation links: About, Blog, Submit, Contact. The main heading is "Explore Chemistry" with the tagline "Quickly find chemical information from authoritative sources". A search bar contains the text "progesterone" and has a magnifying glass icon to its right. A dropdown menu is open below the search bar, displaying a list of suggestions under three columns: Compound, Gene, and Taxonomy. The first suggestion, "progesterone", is highlighted with a pink box. A pink arrow points to the search bar, and another pink arrow points to the magnifying glass icon.

Compound	Gene	Taxonomy
progesterone	progesterone receptor	western predatory mite
Progesterone caproate	chaperone protein HSP26	
Progesterone-d9	Cysteine string protein	
Progesterone, 21-hydroxy-	cysteine-rich protein 3	
Progesterone 6-hemisuccinate	cysteine rich protein 1	
Progesterone, 11alpha-hydroxy-	cysteine rich protein 2	
Progesterone 11-hemisuccinate	cysteine rich protein 3	
Progesterone, 9-bromo-11-oxo-	testis serine protease 6	
Progesterone [Progestins]	sterol carrier protein 2	
Progesterone retard pharlon	cysteine rich protein 61	

110M Compounds 277M Substances 293M Bioactivities 54M Literature 70M Patents

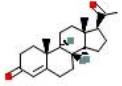
# เจอ Progesterone แล้ว ก็ให้ Copy InChI (อิงคี) ไปวางบน ChemSketch

PubChem About Blog Submit Contact

SEARCH FOR  
progesterone

Treating this as a text search.

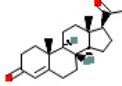
COMPOUND BEST MATCH

 **Progesterone; 57-83-0; Pregn-4-Ene-3,20-Dione; Agolutin; Luteohormone; Crinone; 4-Pregnene-3,20-Dione; Corpus Luteum Hormone; ...**

Compound CID: 5994  
MF: C<sub>21</sub>H<sub>30</sub>O<sub>2</sub> MW: 314.5g/mol  
IUPAC Name: (8S,9S,10R,13S,14S,17S)-17-acetyl-10,13-dimethyl-1,2,6,7,8,9,11,12,14,15,16,17-dodecahydrocyclopenta[a]phenanthren-3-one  
Isomeric SMILES: CC(=O)[C@H]1CC[C@@H]2[C@@]1(CC[C@H]3[C@H]2CCCC=CC(=O)CC[C@]34C)C  
InChIKey: RJKFOVLPORLFTN-LEKSSAKUSA-N  
InChI: InChI=1S/C21H30O2/c1-13(22)17-6-7-18-16-5-4-14-12-15(23)8-10-20(14,21)9-11-21(17,18)3/h12,16-19H,4-11H2,1-3H3/t16-,17+,18-,19-,20-,21+/m0/s1  
Create Date: 2004-09-16

Summary Similar Structures Search Related Records PubMed (MeSH Keyword)

COMPOUND BEST MATCH

 **Progesterone; 57-83-0; Pregn-4-Ene-3,20-Dione; Agolutin; Luteohormone; Crinone; 4-Pregnene-3,20-Dione; Corpus Luteum Hormone; ...**

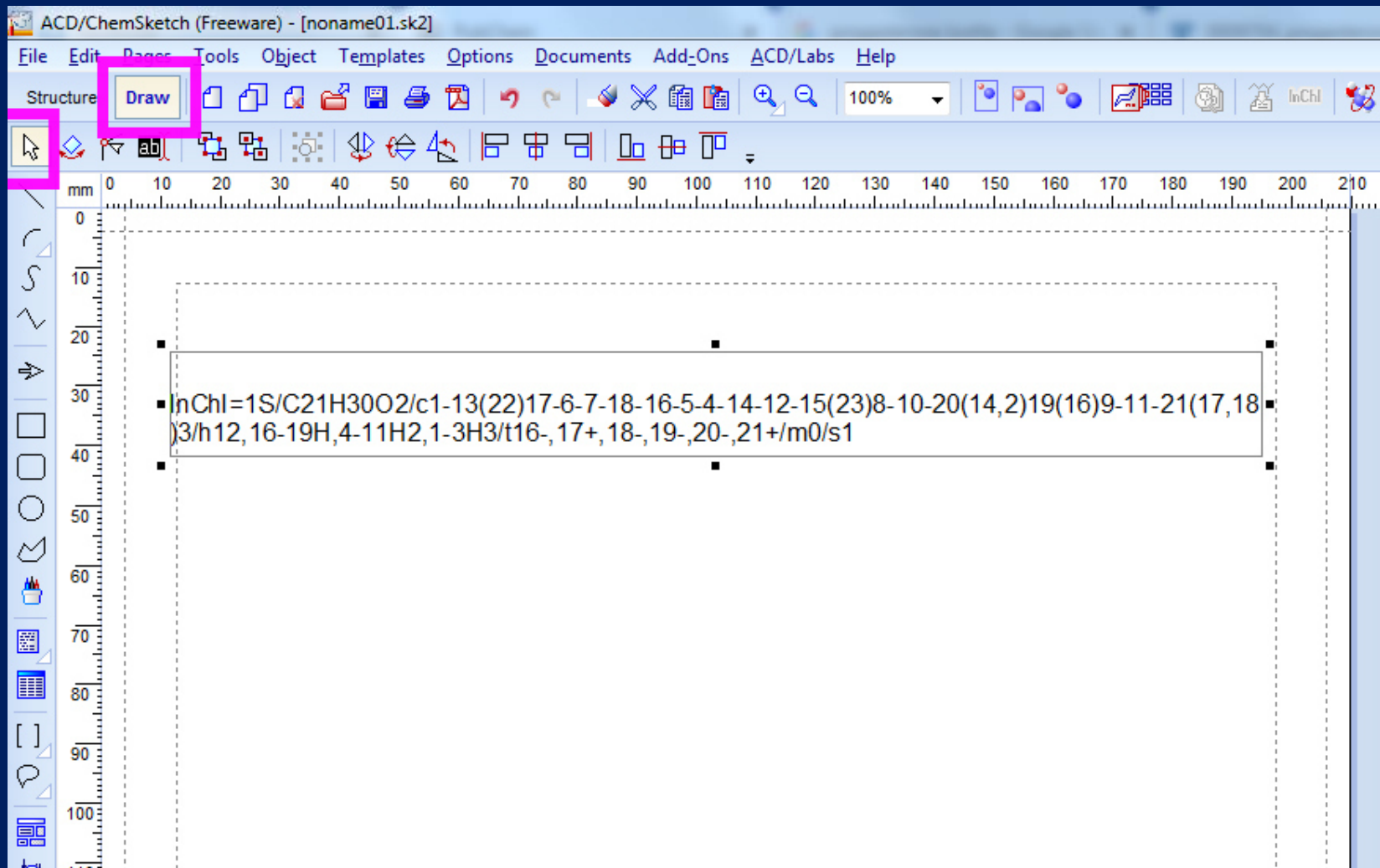
Compound CID: 5994  
MF: C<sub>21</sub>H<sub>30</sub>O<sub>2</sub> MW: 314.5g/mol  
IUPAC Name: (8S,9S,10R,13S,14S,17S)-17-acetyl-10,13-dimethyl-1,2,6,7,8,9,11,12,14,15,16,17-dodecahydrocyclopenta[a]phenanthren-3-one  
Isomeric SMILES: CC(=O)[C@H]1CC[C@@H]2[C@@]1(CC[C@H]3[C@H]2CCCC=CC(=O)CC[C@]34C)C  
InChIKey: RJKFOVLPORLFTN-LEKSSAKUSA-N  
InChI: InChI=1S/C21H30O2/c1-13(22)17-6-7-18-16-5-4-14-12-15(23)8-10-20(14,21)9-11-21(17,18)3/h12,16-19H,4-11H2,1-3H3/t16-,17+,18-,19-,20-,21+/m0/s1  
Create Date: 2004-09-16

Summary Similar Structures Search Related Records PubMed (MeSH Keyword)

คัดลอก Ctrl+C  
คัดลอกลิงก์ไปยังไฮไลต์  
ค้นหา "InChI=1S/C21H30O2/c1-13(22)17-6-7-18-16-5-4-14-12..." ด้วย Google  
พิมพ์... Ctrl+P  
ตรวจสอบ

Compounds Substances Genes Proteins Pathways Bioassays Literature Patents

ตอนวางบน ChemSketch จะอยู่ในโหมด Draw ตามภาพข้างล่างครับ  
เลือกที่วางให้เหมาะกับหน้ากระดาษ โดยไม่ต้องสนใจการตัดคำขึ้นบรรทัดใหม่  
โครงสร้างซับซ้อนอาจจะมี InChI หลายบรรทัดก็ได้

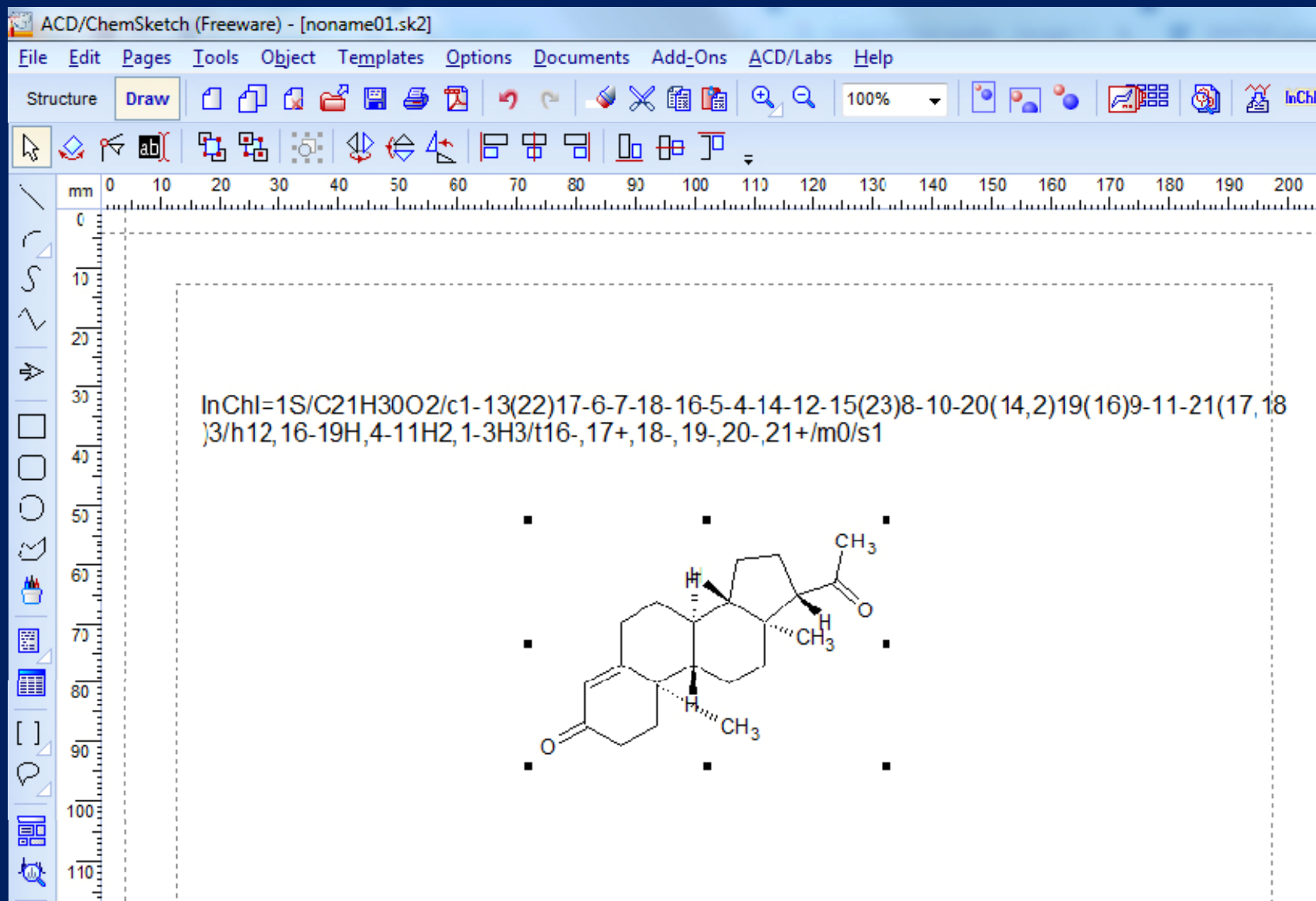


จากนั้นไปที่เมนู Tools > Generate > Structure from InChI

The screenshot shows the ACD/ChemSketch software interface. The 'Tools' menu is open, and the 'Generate' option is selected. A sub-menu is displayed, showing 'Structure from InChI' as the final step in the path. A pink arrow points to the 'Tools' menu, and another pink arrow points to the 'Structure from InChI' option in the sub-menu. The main window displays a chemical structure and its corresponding InChI string.

InChI=1S/C21H30O2/c1-13(22)17-6-7-18-16-5-4-14-12-15(23)8-10-20(14,2)19(16)9-11-21(17,18)3/h12,16-19H,4-11H2,1-3H3/t16-,17+,18-,19-,20-,21+/m0/s1

ก็จะได้โครงสร้างของโปรเจสเตอโรน ตามต้องการ ไม่ต้องวาดเองครับ



Delete InChI ออก ให้เหลือแต่โครงสร้างสาร แล้ว File > Save as > wmf  
ก็จะได้ภาพโครงสร้าง ที่ไม่แตก แม้จะขยายใหญ่ เอาไปแปะในโปรแกรมต่าง ๆ ได้

The screenshot shows the ChemSketch software interface. The main window displays a chemical structure of a complex polycyclic molecule with a ketone group and several methyl groups. A 'Save Document As' dialog box is open, showing the 'Save in' location as 'Desktop' and the 'Folder' as 'D:\My Documents\Desktop'. The 'File name' is 'noname01'. The 'Save as type' dropdown menu is open, showing various file formats, with 'Windows Metafiles (\*.wmf)' selected. The background shows a ruler and a toolbar with various drawing tools.



เช่นวางใน Word หรือ PowerPoint โดยเป็นภาพถูกลิขสิทธิ์ เราไม่ต้องอ้างอิงที่มาภาพ  
ใช้ได้สบายใจ ภาพไม่แตกครับ

Document1 - Microsoft Word

หน้าแรก แทรก คำโครงหน้ากระดาษ การอ้างอิง การส่งจดหมาย ตารางงาน มุมมอง Acrobat

Cordia New (เผื่อความแ่น 14

โปรเจสเตอโรน (Progesterone) เป็นฮอร์โมนเพศชนิดหนึ่ง  
มีลักษณะโครงสร้างทางเคมีดังภาพข้างล่างนี้

CC(=O)C12CC[C@@H]1[C@@H](C)CC[C@H]2[C@@H]3CC[C@@H]([C@H]3)C(=O)C=C

หน้า: 1 จาก 1 คำ: 19