

### Лекція 3

**Тема.** Пакет програмного забезпечення ACD/Labs. Робота в режимі Structure.

**Мета.** Оволодіти навичками набору і редагування хімічних формул в редакторі ACD/Labs. Навчити студентів використовувати бази даних ППЗ.

#### Вступ.

Пакет **ACD/Labs Freeware** складається з двох автономних, але взаємозв'язаних програм [11]:

- **ACD/ChemSketch** – молекулярний редактор двовимірних хімічних структур і графічний редактор;
- **ACD/3D Viewer** – програма моделювання і візуалізації тривимірних структур.

#### План.

1. Редактор ACD/ChemSketch. Загальна характеристика.
2. Робота в режимі Structure.
3. Зміна зовнішнього вигляду структури.
4. Блок кнопок для запису рівнянь хімічних реакцій.
5. Корисні команди в меню. Розділ Tools.

#### Зміст лекції.

##### 1. Редактор ACD/ChemSketch. Загальна характеристика.

Запуск редактора: Програми → ACDLABS 12.0 → ChemSketch

**ChemSketch** працює в двох режимах [11]:

- **Structure** (Структура) – молекулярний редактор: атоми, що зображуються, і хімічні зв'язки є елементами хімічної структури і мають відповідні властивості;
- **Draw** (Малювати) – графічний редактор: всі елементи, що зображуються, є частинами звичайного малюнка.

Для перемикання між режимами служать кнопки Structure і Draw (рис. 3.1).

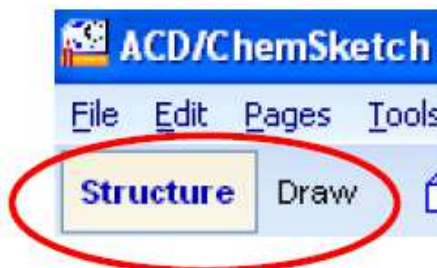


Рис. 3.1. Режими редактора ACD/ChemSketch.

Перемикання також відбувається при натисненні клавіші "пропуск". Програма за замовчуванням завантажується в режимі Structure.

## 2. Робота в режимі Structure.

У основній своїй частині інтерфейс ChemSketch стандартний для такого роду програм (рис. 3.2).

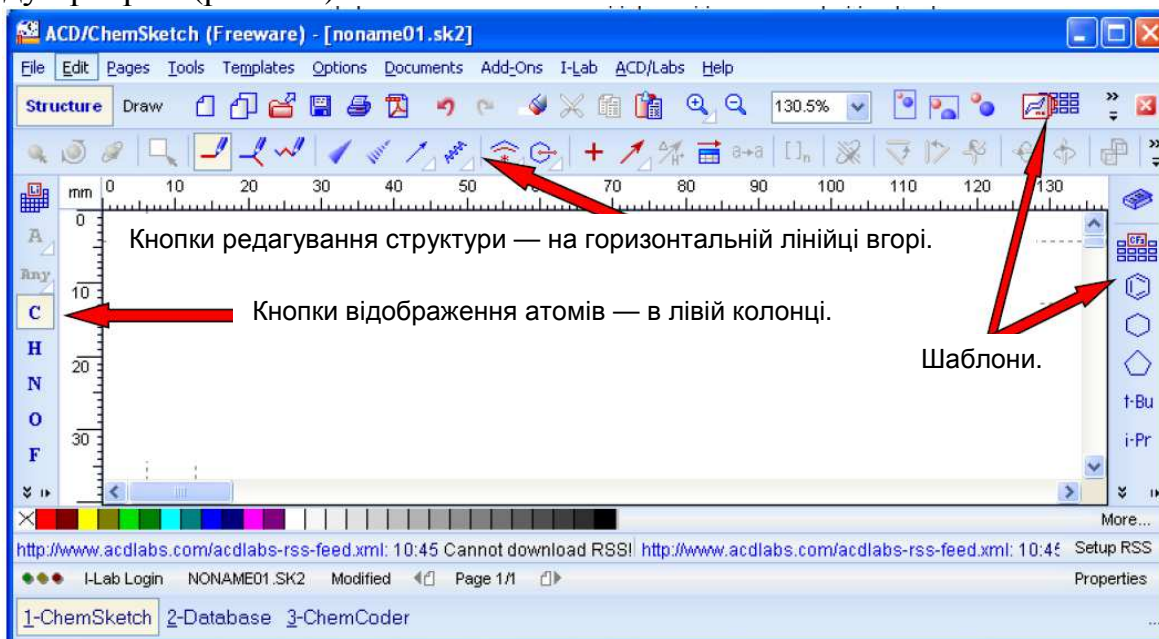
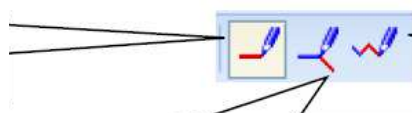


Рис. 3.2. Інтерфейс режиму Structure.

При завантаженні ChemSketch за замовчуванням включаються кнопки: С «атом карбону» і «Звичайне малювання» (Draw Normal) (рис.3.3).

Малювання звичайне  
Draw Normal



Малювати ланцюг  
Draw Chains

Малювання постійне  
Draw Continuous

Рис. 3.3. Функція «Малювання».

Виконання основних операцій при натиснутій кнопці **Draw Normal**:

- додати зв'язок в стандартному напрямі – клацнути на атомі;
- додати зв'язок в заданому напрямі – клацнути на атомі і, не відпускаючи клавішу мишки пересунути курсор в потрібному напрямі.;
- намалювати зв'язок між наявними атомами – клацнути на першому атомі і, не відпускаючи клавішу мишки, тягнути зв'язок до другого атома;
- змінити порядок зв'язку – клацнути на зв'язку.

Дія кнопки **Draw Continuous** є аналогічною крім того, що при першому клацанні на атомі він виділяється, а додавання зв'язку відбувається

при другому клацанні.

**Draw Chains** «Малювати ланцюг»: клацнути на атомі і тягнути ланцюг в потрібному напрямі на потрібну довжину.



– кнопка «**Періодична таблиця**». Якщо в лівій колонці відсутня кнопка якого-небудь хімічного елементу, її додають з Періодичної системи.

- Кнопка залишається на панелі на весь сеанс.
- Щоб під час сеансу видалити таку кнопку, слід двічі клацнути по панелі і потім в віконці, що з'явилося, підтвердити видалення.

**Кнопки виділення.** Програма містить 4 кнопки для виділення структури або її частини і подальшої маніпуляції з виділеним об'єктом (рис. 3.4).

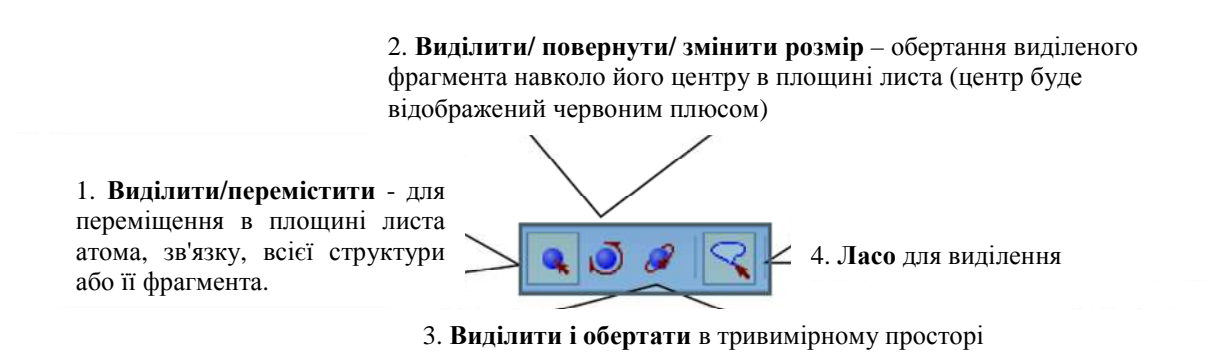
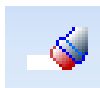


Рис. 3.4. Призначення кнопок виділення.

При відтисненій кнопці «Ласо» виділяється прямокутник, при натиснутій – площа будь-якої конфігурації.

Особливістю кнопок 2, 3, 4 є те, що процес проводиться в дві стадії:

- при виділенні об'єкту у вузлах (на атомах, в центрах зв'язків) з'являються маленькі білі квадратики;
- для маніпуляції з виділеним об'єктом необхідно встановити курсор на будь-якому з цих квадратиків, і якщо вони зафарбовуються в чорний колір, можна виконувати відповідну дію.



**Delete (Стерти/ видалити).** Видалення атома або зв'язку:

- натиснути кнопку «Видалити» (при цьому змінюється форма курсору), потім клацнути на атомі або зв'язку. Атом видаляється зі всіма його зв'язками, причому, якщо в результаті цієї операції утворилися б одиночні незв'язані атоми, то вони зникають теж.

Якщо необхідно видалити тільки центральний атом, але зберегти периферійні, то видалення проводять при натиснутій кнопці Ctrl.

*Видалення фрагмента або всієї структури:*

- натиснути кнопку «Видалити», обвести курсором структуру, що видаляється, або її частину. Обведена курсором структура

виділяється – на атомах і зв'язках з'являються маленькі квадрати. При наведенні курсору на квадрат, він стає активним – зафарбовується чорним кольором.

Якщо клацнути на будь-якому чорному квадраті, виділена структура видаляється.

### 3. Зміна зовнішнього вигляду структури.

Інструменти для зміни зовнішнього виду структури приведені на рис. 3.5.

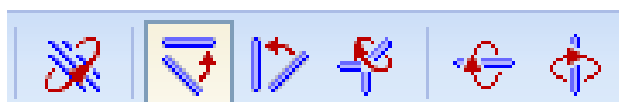

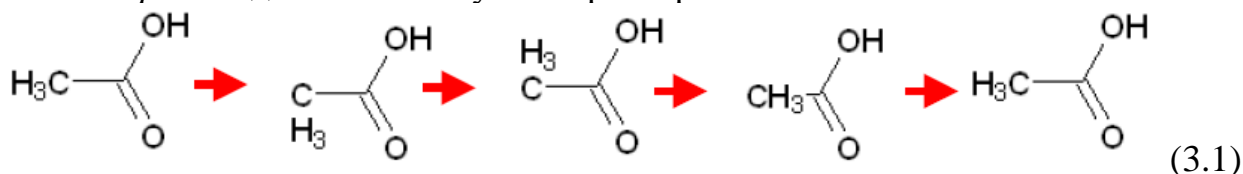



Рис. 3.5. Інструменти для зміни зовнішнього виду структури.

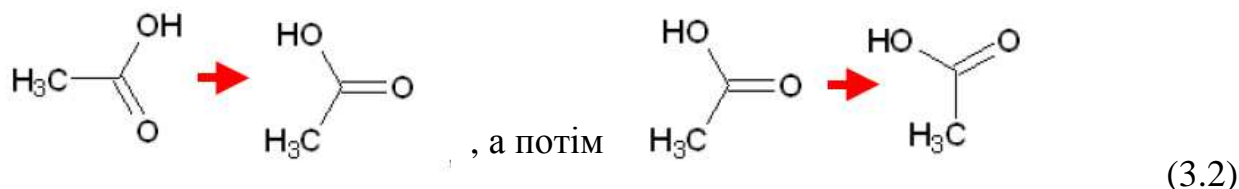
Кнопка  призначена для зміни положення атомів гідрогену, для зміни вигляду подвійного зв'язку (слід при натиснутій кнопці клацати на групі  $\text{CH}_n$  або на зв'язку).


*Вправа.* Здійснити наступні перетворення:



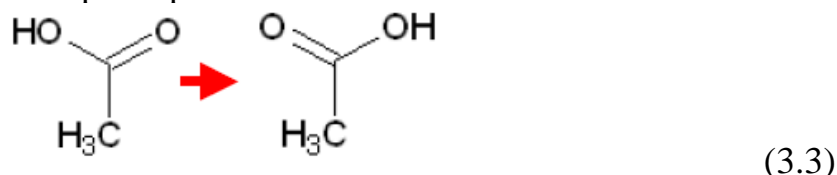
Інструменти  призначені для розвороту структури в площині листа так, щоб вказаний зв'язок виявився горизонтально або вертикально (при натиснутій відповідній кнопці слід клацнути на цьому зв'язку).


*Вправа.* Здійснити наступні перетворення:



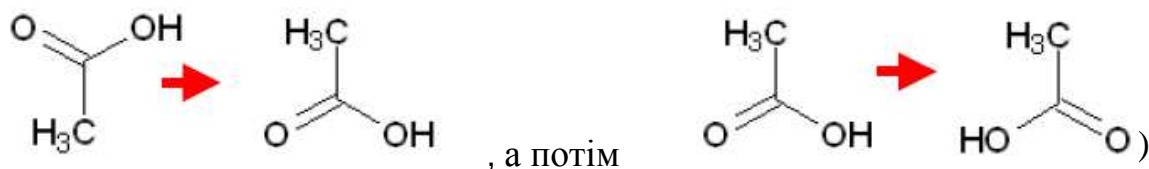
 - поворот на  $180^\circ$  навколо зв'язку – при натиснутій кнопці слід клацнути на відповідних зв'язках.

*Вправа.* Здійснити наступне перетворення:



 - обертання на  $180^\circ$  по осях  $x$  і  $y$  – клацнути по одній з цих кнопок.

Вправа. Здійснити наступні перетворення:



[ ]<sub>n</sub>

«Полімер» – для взяття в дужок ланки полімеру.

При клацанні по кнопці «Полімер» з'являється віконце, в якому слід вибрати параметри (рис. 3.6):

Index – ступінь полімеризації

Connectivity – порядок з'єднання мономерних ланок:

«голова до хвоста» (head-to-tail)

«голова до голови» (head-to-head)

«будь-яке» (either/unknown).

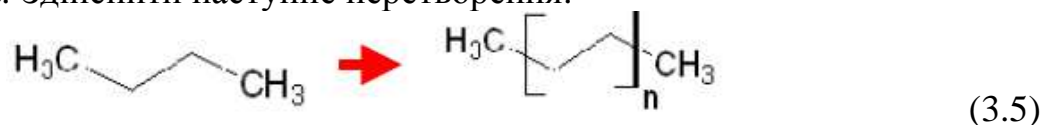
Style – вид дужок.



Рис. 3.6. Інструмент «Полімер».

Після натиснення кнопки Apply слід клацнути на лівій межі ланки ланцюга і, не відпускаючи клавіші мишки, пересунути курсор на праву межу ланки.

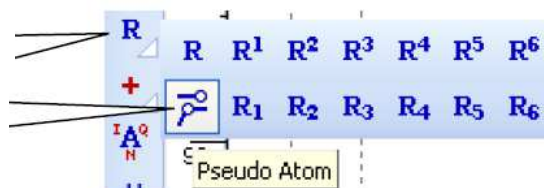
Вправа. Здійснити наступне перетворення:



Якщо при відображенні полімеру необхідно вказати кінцевий зв'язок без атома, кінцевий атом замінюють «псевдо-атомом» (рис. 3.7):

1. У лівій колонці клацнути по трикутнику кнопки R – відкривається список

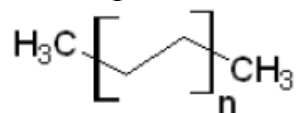
2. Клацнути по кнопці «псевдо-атом»




3. Клацнути в структурі по кінцевих атомах карбону.

Рис. 3.7. Використання «псевдо-атомів».

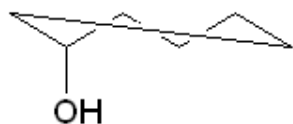
*Вправа:* Замінити кінці полімерного ланцюга «псевдо-атомами»:



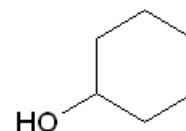
(3.6)

 Clean Structure (Стирання структури). Кнопка дозволяє «підчистити структуру» – стандартизувати довжини зв'язків і кути між зв'язками і зробити їх зовні акуратними.

*Вправа:*



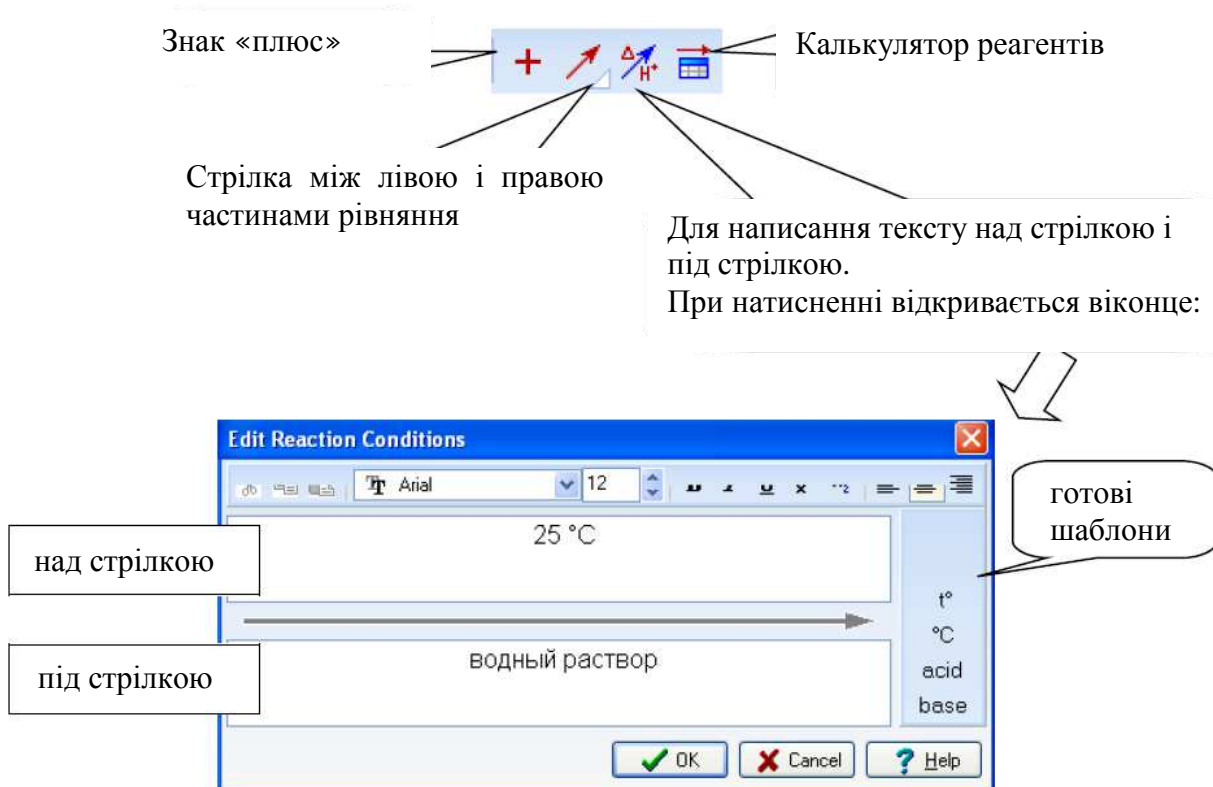
перетворити на структуру



(3.7)

#### 4. Блок кнопок для запису рівнянь хімічних реакцій.

Інструменти, що використовуються для запису хімічних рівнянь представлені на рис. 3.8.



Знак «плюс»

Калькулятор реагентів

Стрілка між лівою і правою частинами рівняння

Для написання тексту над стрілкою і під стрілкою.  
При натисненні відкривається віконце:

над стрілкою

під стрілкою

готові шаблони

25 °C

водный раствор

t°  
°C  
acid  
base

OK Cancel Help

Рис. 3.8. Функції інструментів, що використовуються для запису хімічних рівнянь.

## 5. Корисні команди в меню. Розділ Tools.

Спеціальні можливості редактора ChemSketch показано на рис. 3.9.

На екрані можна показувати або приховувати ті атоми гідрогену, які насичують вільні валентності (Explicit Hydrogens)

Показати атоми H

Заховати атоми H

Програма уміє генерувати систематичні назви R/S-стереодескриптори, коди SMILES і InChI, а також генерувати структурні формули за відомими кодами SMILES і InChI.

Програма уміє розраховувати фізико-хімічні параметри речовини.

Tools	Templates	Options	Documents	Add_Or
Structure Properties				Alt+Shift+S
Clean Structure				F9
Check Tautomeric Forms				Ctrl+Shift+T
3D Structure Optimization				Ctrl+Shift+3
MassSpec Scissors				
Show Aromaticity				Ctrl+Shift+A
Hide Aromaticity				Ctrl+Shift+H
Expand Shorthand Formulae				Ctrl+Shift+F
Add Explicit Hydrogens				Ctrl+Shift+Y
Remove Explicit Hydrogens				Ctrl+Shift+R
Bring Bond(s) to Front				Ctrl+F
Send Bond(s) to Back				Ctrl+K
Auto Renumbering				Ctrl+Shift+N
Clear Numbering				Ctrl+Shift+L
Generate				
Search for Structure...				Ctrl+Shift+C
Calculate				

Name for Structure	Ctrl+Shift+I
Stereo Descriptors	
Stereo Descriptors Options...	
SMILES Notation	
Structure from SMILES	
InChI for Structure	
InChI Options...	
Structure from InChI	

Molecular Formula
Formula Weight
Composition
Molar Refractivity
Molar Volume
Parachor
Index of Refraction
Surface Tension
Density
Dielectric Constant
Polarizability
Monoisotopic Mass
Nominal Mass
Average Mass
M+
M-
[M+H] <sup>+</sup>
[M+H] <sup>-</sup>
[M-H] <sup>+</sup>
[M-H] <sup>-</sup>
All Properties
Select Properties to Calculate...
Selected Properties

Рис. 3.9. Спеціальні можливості редактора ChemSketch.



## Висновки.

Досвід використання інформаційних технологій в процесі викладання хімічних дисциплін студентам природничих спеціальностей свідчить про появу нових можливостей, які не досягаються іншими традиційними засобами.

При вивченні хімії комп'ютер слід використовувати, враховуючи особливості цієї науки. Виділяють три основні напрями його застосування: моделювання хімічних процесів і явищ; контроль і обробка даних хімічного експерименту; програмна підтримка курсу хімічних дисциплін.

ACD/3D Viewer – програма швидкого і точного моделювання і візуалізації структур. Вона повністю пов'язана з програмою ACD/ChemSketch, що дозволяє малювати структури 2D і швидко отримувати з них прекрасні кольорові 3D зображення.

## Література.

1. Аспицкая А.Ф. Использование информационно-коммуникационных технологий при обучении химии: метод. пособие/ А.Ф. Аспицкая, Л.В. Кирсберг. - М.: Бином; Лаборатория Знаний, 2009. -356 с.
2. Ахметов М.А., Денисова О.Ф. //Химия: методика преподавания. - 2004. - №1. -С. 35.
3. Добротин Д. Ю. Интернет в обучении химии / Д. Ю. Добротин, А. А. Жулин // Химия в школе. – 2001. – № 7. – С. 52–55.
4. Довгопола О. В. Підготовка майбутнього вчителя до впровадження комп'ютерних технологій / О. В. Довгопола // Освіта Донбасу. – 2006. – № 3. – С. 116–117.
5. Литвак М.М., Литвак Н.В. //Химия: методика преподавания. - 2005. - №4. - С. 47.
6. Марченко І., Посторонко А. Особистісно-орієнтований підхід при організації навчання з фахових хімічних дисциплін/ Marchenko\_Postoronko\_article\_31.
7. Мультимедиа в образовании : специализированный учебный курс / Бент Б. Андерсен, Катя ванн ден Бринк; авторизованный пер. с англ. – М.: Дрофа, 2007. – 224 с. – (Информационные технологии в образовании).
8. Пакет програмного забезпечення ACD/Labs
9. Программа по биоорганической химии. - М.: ГОУ ВУНМЦ МЗ РФ, 2000, -18 с.; МО РФ, 2004.
10. Рощупкин С.И. //Химия: методика преподавания. - 2004. - №1. - С. 46.
11. Современные технологии в процессе преподавания химии: Развивающее обучение, проблемное обучение, проектное обучение, кооперация в обучении, компьютерные технологии / Авт.-сост. С. В. Дендебер, О. В. Ключникова. – 2-е изд. – М.: 5 за знания, 2008. – 112 с. – (Методическая библиотека).
12. Соловьев М.Е., Соловьев М.М. //Компьютерная химия. - М.: СОЛОН-Пресс, 2005. - 536 с.

13. Титаренко Н. В. Використання комп'ютерних навчальних програм з хімії / Н. В. Титаренко // Біологія та хімія в школі. – 2004. – № 1. – С. 9–12.
14. Тюкавкина Н.А., Бауков Ю.И. //Биоорганическая химия: Учебник для вузов. - М.: Дрофа, 2004. - 544 с.: ил.
15. Шабаршин В.М. //Химия: методика преподавания. - 2004. - №2. - С. 33.

#### **Запитання для самоперевірки.**

1. Дайте загальну характеристику редактора ACD/ChemSketch.
2. Як запустити редактор ACD/ChemSketch?
3. Вкажіть режими роботи ChemSketch. Як переключити режими роботи?
4. Дайте коротку характеристику інтерфейсу режиму Structure.
5. Виконання основних операцій при натиснутій кнопці Draw Normal.
6. Які кнопки виділення містить програма ChemSketch?