

Лекція 5

Тема. Пакет програмного забезпечення ACD/Labs. ACD/3D Viewer.

Мета. Оволодіти навичками швидкого і точного моделювання і візуалізації структур в програмі ACD/3D Viewer пакету 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.

5. Налаштування зображення молекули.


6. Збереження і завантаження параметрів налаштування зображення.


7. Обчислення і зміна структурних параметрів.


Зміст лекції.


5. Налаштування зображення молекули.

1. Обертання, переміщення і зміна масштабу зображення.

1. Клацнути 3D Rotate (3D обертання)  і переміститися у робочому просторі, для того щоб обертати структуру в тривимірному просторі.


2. Після цього перемкнутися на режим Z- обертання, клацаючи Rotate (Обертання)  переміститися по робочому просторі, структура буде обертатися тільки в двовимірному просторі.


3. Клацнути Move (Переміщення) , щоб включити режим Drag (Перетягування), де можна переміщати структуру в просторі вниз, вліво або вправо.

4. Для того, щоб змінювати розмір структури, потрібно клацнути Resize (Зміна розміру) . Переміщення від центру структури до меж екрану – збільшує розмір структури, переміщення до центру структури робить її меншою.

5. Клацнути 3D Rotate , щоб включити режим 3D обертань.



2. Зміна зображення структури.

1. Для того щоб представити наявну структуру у вигляді кулестержневої, потрібно клацнути Balls and Sticks (Кулі і Стержні) .

2. Щоб додати ореол точок до робочого представлення молекули, потрібно клацнути With Dots (З точками) .

Приблизний вигляд структури показано на рис. 4.4.

3. Для того щоб зобразити багатократні зв'язки, слід включити режим Wireframe (Дротяний), натискаючи на інструментальній панелі Top (Топ) і потім з меню View (Вид) вибрати Show Multiple Bonds (Зображення багатократних зв'язків) (рис. 4.5).

Для того щоб молекула подібної структури оберталася автоматично без зміни її стилю, потрібно натиснути Auto Rotate (Автоматичне обертання) . (Щоб обертати молекулу автоматично, змінюючи її стиль, слід натиснути Auto Rotate and Change Style ).

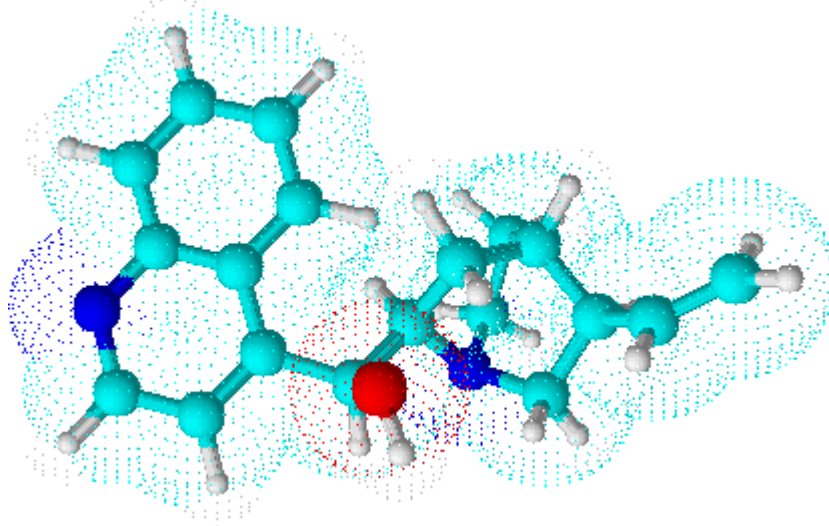


Рис. 4.4. Кулестержнева структура.

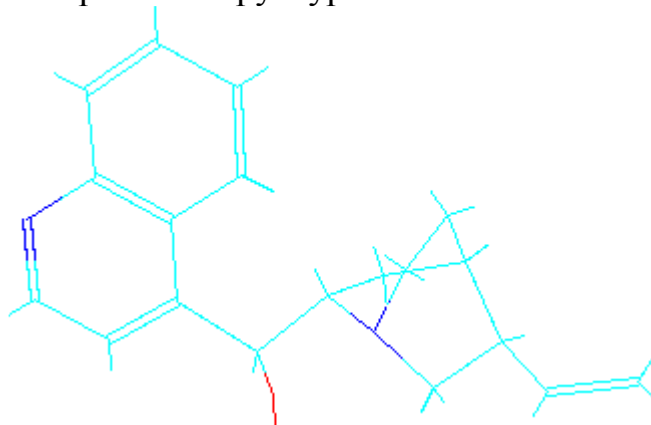









Рис. 4.5. Зображення багатократних зв'язків.

Примітка: щоб представити структуру у вигляді дисків, дротів, точок, сфер: натискають відповідні кнопки на інструментальній панелі (   або ). Також можна натиснути правою кнопкою миші в робочому просторі вікна, щоб перемкнути тип кнопки режиму представлення. (Якщо активований будь-який інструментальний засіб (  або ), клацання правою кнопкою миші перемикає тільки ці зображені кнопки.

3. Зміна кольору




У меню Options (Опції) потрібно вибрати Colors (Кольори) або натиснути Set Colors (Набір кольорів) , для того щоб відобразити діалогове вікно Colors (рис. 4.6).



Рис. 4.6. Діалогове вікно Colors.


2. Для того щоб змінити колір фону дисплея, потрібно вибрати бажаний колір у вікні Background (Фон). Якщо друкувати часто і багато, то найкращим буде встановлення білого кольору фону, щоб заощадити чорнило.

3. Після встановлення розмірів, наборів атомів, відстані і кути між якими мають певні значення, встановлюється спеціальний колір підсвічування. Цей колір за замовчуванням є яскраво зеленим. Щоб змінювати колір вибраних атомів, в списку Selection (Вибір) потрібно вибрати бажаний колір і клацнути ОК.

Примітка: вибір працює окремо з інструментальними засобами Distance (Відстань) , Angle(Кут)  і Torsion Angle (Торсійний кут).

4. Щоб змінити колір хімічного елементу, слід натиснути на назві елементу в списку і потім вибрати бажаний колір у вікні справа. Встановивши прапорець Alphabetical Order (Алфавітний порядок), назви елементів в списку встановлюються в алфавітному порядку. У іншому випадку вони розташовуються відповідно до свого місця в Періодичній таблиці елементів.


4. Отримання дзеркального зображення.


1. Для одержання дзеркального зображення відтвореної структури потрібно натиснути Mirror (Дзеркало) . У цьому випадку увесь порядок стереоцентрів в початковій структурі буде інвертований.

2. Щоб повернутися назад до початкового виду, потрібно натиснути цю кнопку знову.

5. Інверсія центру структури.

1. Invert Center (Інверсія центру) – цей інструмент інвертує конфігурацію хірального центру, змінюючи просторову позицію одного або

декількох заміщених вибраних атомів. (Натиснути Invert Center (Інверсія центру) , і потім натиснути на атомі, щоб інвертувати його.

Після цієї операції може виникнути потреба оптимізувати хімічну структуру ще раз. Щоб це здійснити, потрібно клацнути 3D Optimization (3D оптимізація)  на інструментальній панелі Top.

2. Щоб повернутися назад до початкового виду, слід натиснути знову Invert Center.

6. Зміна радіусу атома.

У меню Options (Опції) потрібно вибрати Radii (Радіус), щоб відкрити діалогове вікно Atomic Radii (Радіус атома), що містить параметри за замовчуванням радіусів атомів різних елементів (рис. 4.7).

2. Щоб побачити радіус будь-якого елемента, потрібно натиснути на ньому в списку. У правому стовпці висвічується відповідне значення.

3. Щоб змінити радіус атома елемента, слід двічі натиснути на ньому в списку і надрукувати нове значення, наприклад, 0.5 у блоці Change Radius (Зміна радіусу), що з'являється (рис. 4.8).

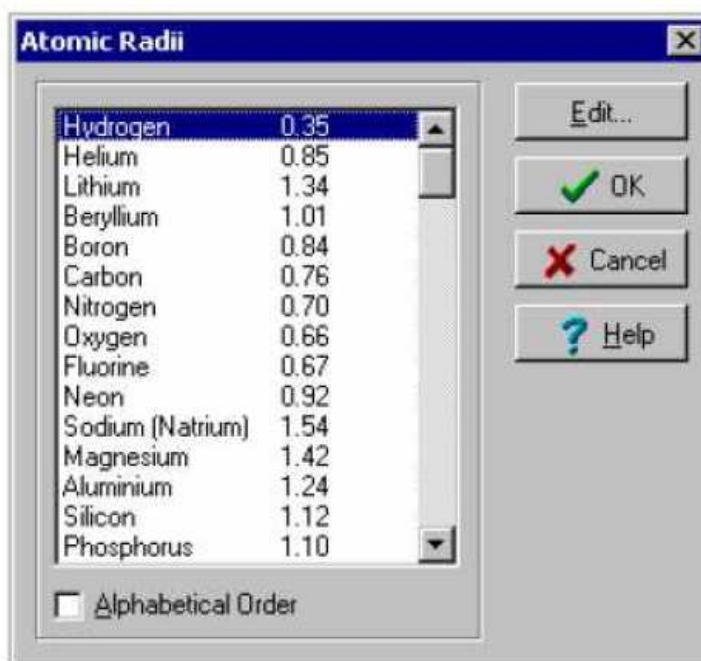


Рис. 4.7. Діалогове вікно Atomic Radii (Радіус атома).

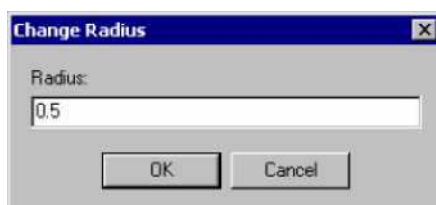


Рис. 4.8. Блок Change Radius (Зміна радіусу).

4. Натиснути OK щоб підтвердити зміни. Атомний радіус буде виражений у відносних одиницях.

5. Виконавши зміни в діалоговому вікні Atomic Radii (Атомний радіус), натиснути ОК. Наступного разу, запускаючи програму ACD/3D Viewer задані за замовчуванням значення, будуть скинуті до їх попередніх значень.

7. Зміна зображення радіусу атома.

1. Натиснути Increase Atoms' Radii by 5% (Збільшення радіусу на 5%)



. Кожне додаткове натискання цієї кнопки збільшує розмір радіусу зображених атомів на 5%.

2. Натиснути Decrease Atoms' Radii by 5% (Зменшення радіусу на 5%)



, щоб зменшити розмір усіх зображених атомів на 5%.

Вказані інструментальні засоби не зачіпають фактичних розмірів радіусів атомів (визначених в діалоговому вікні Atomic Radii), а тільки змінюють зображення.

6. Збереження і завантаження параметрів налаштування зображення.

1. Збереження параметрів налаштування зображення.

1. З меню Options (Опції), вибрати Save Settings (Збереження змін), щоб відобразити діалогове вікно, зображене на рис. 4.9.



Рис. 4.9. Діалогове вікно Save Settings (Збереження змін).

2. Встановити помітки тих ознак, які потрібно зберегти. Встановлення прапорця Radii (Радіус) дозволить зберегти параметри налаштування, вказані в діалоговому вікні Atomic Radii (Радіус атома), але не поточні опції зображення радіусу.

3. У діалоговому вікні, що з'являється, потрібно вказати назву файлу і місце (диск і каталог) розташування і клацнути ОК. Файл має бути збережений з розширенням .3DS.

4. Клацнути Save (Зберегти) для збереження файлу.

2. Завантаження параметрів налаштування зображення.

Якщо користувачем заздалегідь збережено параметри налаштування, то їх можна завантажити і для поточного сеансу.

1. У меню Options (Опції) виберіть Load Settings (Завантаження параметрів), щоб відкрити діалогове вікно Load Settings.

2. Знайти .3DS файл, який потрібно завантажити.

3. Клацнути Open (Відкрити). Параметри налаштування, які містяться в

цьому файлі, будуть завантажені під час поточного робочого сеансу.

3. Установка параметрів налаштування зображення за замовчуванням. Якщо користувач використовує певні параметри налаштування, кожного разу під час роботи з програмою ACD/3D Viewer, їх потрібно встановити як задані за замовчуванням.

1. Визначити необхідні параметри налаштувань представлення.
2. Зберегти їх у файлі, для цього в меню Options (Опції) вибрати Save Settings (Зберегти зміни).


3. У меню Options вибрати Set Default Settings (Набір передбачуваних змін). Знайти файл з налаштуванням, яке потрібно встановити як значення за замовчуванням.

4. Клацнути Open (Відкрити). Після цього кожного разу при відкритті ACD/3D Viewer, вказані параметри налаштування завантажуватимуться, поки не будуть встановлені інші.

Щоб повернутися до системних параметрів за замовчуванням, в меню Options слід вибрати Restore Default Settings (Відновлення передбачуваних змін).

7. Обчислення і зміна структурних параметрів.

1. Обчислення і зміна відстані між двома атомами.

1. Перемикач Balls and Sticks (Кулі і стержні)  атомів пропонує режим кращого представлення.

2. Клацнути Distance (Відстань) .

3. Клацнути на будь-якому атомі, щоб вибрати його, потім перемістити вказівник на інший атом, і клацнути і на ньому, щоб засвітити ці два атоми вибраним кольором. З'являється діалогове вікно Internuclear Distance (Міжядерна відстань) (рис. 4.10).

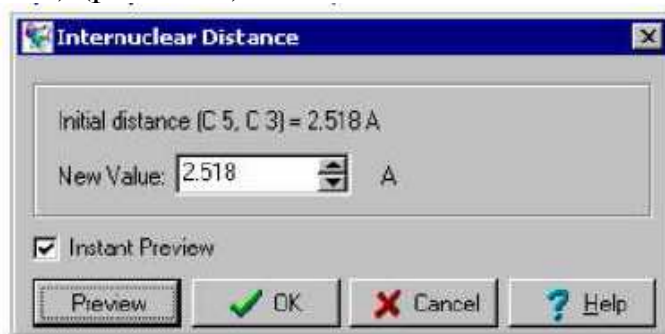


Рис. 4.10. Діалогове вікно Internuclear Distance (Міжядерна відстань).

З рис. 4.10 видно, що відстань між вибраними атомами:

Distance (C 5, C 3) = 2.5180 A (0,2518 нм)

4. Бажаючи змінити відстань між атомами, в діалоговому вікні Internuclear Distance, друкують бажане значення у блоці New Value (Нове значення). Якщо прапорець встановлений у Instant Preview (Негайне застосування), зміни негайно застосовуються. Якщо прапорець не

встановлений, після кожної зміни потрібно клацнути Preview (Застосувати). Початкова відстань завжди представлена в діалоговому вікні, при потребі можна легко повернутися до початкових параметрів налаштування.

5. Клацнути ОК, щоб застосувати зміну (будь-яку) і закрити діалогове вікно.

6. Щоб відмінити вибір і запустити нову зміну, натиснути будь-де на порожньому місці робочого простору.

2. Обчислення і зміна кута між двома зв'язками.

1. Клацнути Angle(Кут) .

2. Клацнути на двох сусідніх атомах, що створюють між собою зв'язок. Перемістити вказівник на третій атом, який утворює зв'язок з останнім вибраним атомом. Відкриється діалогове вікно Bond Angle (Кут зв'язку) (рис. 4.11).

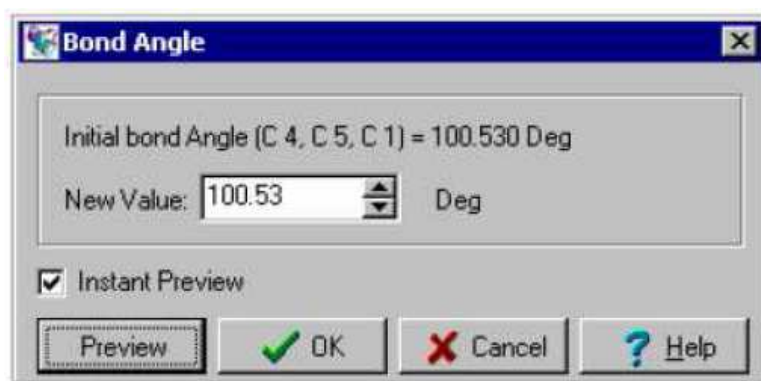


Рис. 4.11. Діалогове вікно Bond Angle (Кут зв'язку).

Також, в рядку стану з'являється розраховане кутове значення, наприклад:

Bond Angle (C 4, C 5, C 1) = 100.530 Deg

4. Щоб змінити значення кута, в діалоговому вікні Bond Angle (Кут зв'язку), друкують бажане значення у блоці New Value (Нове значення). Якщо прапорець Instant Preview (Негайне застосування) встановлений, зміни негайно застосовуються. Початковий кут завжди представлений в діалоговому вікні, якщо виникла потреба не змінювати кут, можна легко повернутися до початкових параметрів налаштування.

5. Клацнути ОК, щоб застосувати зміну (будь-яку) і закрити діалогове вікно. Щоб відмінити вибір і запустити нову зміну, натиснути де-небудь на порожньому місці робочого простору. Щоб припинити використання цього інструменту, потрібно натиснути на його кнопки, щоб зняти виділення.

3. Обчислення і зміна торсійного кута.

1. Клацнути Torsion Angle (Торсіонний кут) .

2. Клацнути на двох атомах, що утворюють спільний зв'язок. Вказаний зв'язок стає вибраним.

Таким самим чином потрібно клацнути ще на двох атомах, суміжних з раніше вибраним зв'язком. У результаті будуть вибрані три суміжні зв'язки,

що створюють торсійний кут. З'являється діалогове вікно Torsion Angle (рис. 4.12).

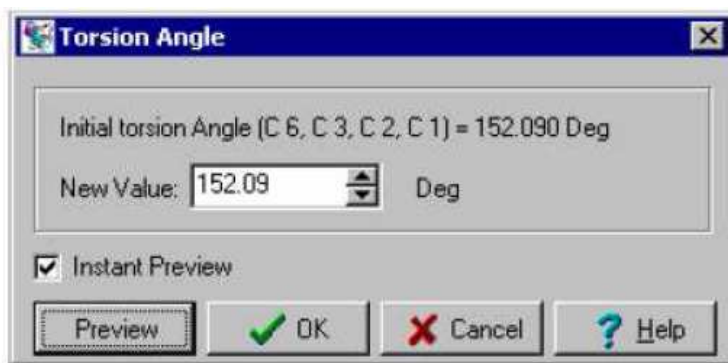


Рис. 4.12. діалогове вікно Torsion Angle (Торсійний кут).

3. Не вибравши третій зв'язок, можна проглянути значення усіх можливих кутів повороту, що межують з останнім вибраним атомом, переміщаючи вказівник між суміжними атомами.

4. Якщо прапорець Instant Preview (Негайне застосування) встановлений, зміни негайно застосовуються. Початковий торсійний кут завжди представлений в діалоговому вікні. Якщо користувач не змінює кут, можна легко повернутися до початкових параметрів налаштування.

5. Клацнути ОК, щоб застосувати зміну (будь-яку) і закрити діалогове вікно. Щоб відмінити вибір і запустити нову зміну, потрібно натиснути де-небудь на порожньому місці робочого простору. Для припинення використання цього інструменту, слід натиснути на його кнопці, щоб зняти виділення.

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. Журин // 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. З яких програм складається пакет ACD/Labs?
2. Дайте загальну характеристику програмі ACD/3D Viewer.
3. Які операції можна здійснювати, використовуючи програму ACD/3D Viewer?
4. Що таке алгоритм 3D оптимізації?
5. Вкажіть обмеження оптимізації ACD/3D.