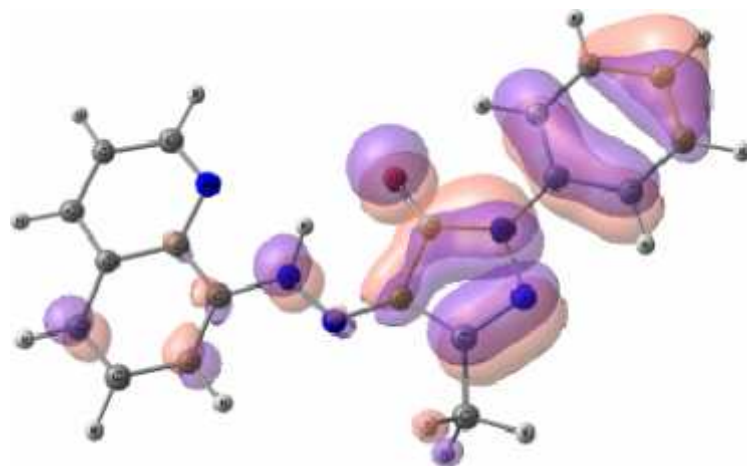


А. В. КУРЗИН, Л. М. ПОПОВА, А. Н. ЕВДОКИМОВ

ХИМИЧЕСКИЕ РЕДАКТОРЫ

УЧЕБНОЕ ПОСОБИЕ



Санкт-Петербург

2014

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ
УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ПРОФЕССИОНАЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ

«САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ
ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ
РАСТИТЕЛЬНЫХ ПОЛИМЕРОВ»

А. В. КУРЗИН, Л. М. ПОПОВА, А. Н. ЕВДОКИМОВ

ХИМИЧЕСКИЕ РЕДАКТОРЫ

Учебное пособие

Санкт-Петербург
2014

УДК 681.3:54(075)

К 930

ББК 32.97я7

Курзин А. В., Попова Л. М., Евдокимов А. Н. Химические редакторы: учебное пособие / СПбГТУРП, – СПб, 2014. – 125 с.:

В учебном пособии обобщены и рассмотрены приемы работы с популярными в среде студентов-химиков и специалистов редакторами химических формул: ACD/ChemSketch, ISIS/Draw, ChemWindow, Chem Office, Symyx Draw, ChemCraft, с помощью которых составляются структурные формулы органических веществ в 2D и 3D проекциях. С помощью редакторов можно генерировать названия веществ по их структуре, рассчитать физические свойства веществ квантово-химическими методами, теоретические ЯМР, ИК спектры и др.

Учебное пособие предназначено для студентов химико-технологического факультета, обучающихся по направлению подготовки бакалавров 18.03.01 и магистров 18.04.01 «Химическая технология».

Рецензенты:

А. В. де Векки, доктор химических наук, профессор кафедры химии и биотехнологии СПбГТЭУ, заслуж. деятель науки РФ;

З. М. Саркисян, кандидат химических наук, доцент СПбГХФА.

Рекомендовано к изданию Редакционно-издательским советом университета в качестве учебного пособия.

© Санкт-Петербургский государственный
технологический университет растительных
полимеров, 2014

© Курзин А.В., Попова Л.М., Евдокимов А.Н., 2014

ПРЕДИСЛОВИЕ

Создание и совершенствование компьютерной техники, появление новых технологий передачи, обработки, накопления и представления информации облегчило и ускорило вычислительную работу во многих областях науки и, в частности, в химии. Квантовая химия, молекулярная механика, планирование химического синтеза, получение и обработка экспериментальных данных с помощью новых информационных технологий и компьютерной техники – это лишь некоторые типичные примеры. Увеличение вклада информационных технологий в развитие химии связано, в первую очередь, с появлением персональных компьютеров с высокими эксплуатационными характеристиками и новых технологий передачи информации. Благодаря их относительно низкой цене и доступности для широкого круга пользователей такое оборудование стало обычным в большинстве химических лабораторий и учебных заведениях мира.

Одной из сфер использования компьютеров среди химиков является подготовка текстов, содержащих химические структуры. Популярные текстовые редакторы, например Microsoft Word и др., несмотря на свои широкие возможности, не имеют удобных инструментов для создания химических структур высокого качества. Для их создания и редактирования имеется целый ряд программных решений, с некоторыми мы и познакомимся в настоящем пособии. Они различаются по специализации и своим возможностям, по степени сложности интерфейса и работы в них и т.д.

В связи с большой распространенностью программ, работающих в ОС Windows, в настоящем пособии внимание уделено только программам, работающим под управлением данной операционной системы. При этом следует иметь в виду, что существуют как версии рассмотренных программ для других операционных систем, так и самостоятельные программные продукты. Отдельную область представляют собой онлайн-химические редакторы. В пособии дается достаточно полное описание химических редакторов ACD/ChemSketch, ISIS/Draw, ChemWindow, ChemDraw, Symyx Draw, ChemCraft, необходимых в повседневной работе студентов над курсовыми работами, различными отчетами и рефератами, а также при оформлении бакалаврских дипломов и магистерских диссертаций.

Цель пособия: знакомство с некоторыми основными видами программного обеспечения, используемого в области химии для рисования структурных формул и 3D визуализации молекулярной структуры, которая дает возможность оценить взаимное расположение атомов молекулы в пространстве, найти межатомные расстояния и валентные углы позволяет решать многие задачи строения и реакционной способности молекул.

1. ПРОГРАММНЫЙ ПАКЕТ ACDLABS

Advanced Chemistry Development, Inc. – это канадская компания, разрабатывающая программное обеспечение ACD/Labs для ученых и специалистов в области химических, биохимических и фармацевтических исследований, основана выпускниками Московского государственного университета. Область деятельности компании лежит в создании программ для рутинной работы, анализа, предсказания свойств и управления уже полученными результатами спектроскопических, хроматографических и других методов инструментального анализа химических веществ. Также программный комплекс ACD/Labs известен благодаря возможности предсказывать такие физико-химические свойства, как pK_a и $\log D$, и умению генерировать название вещества в различных видах номенклатур. Для построения и визуализации структурных формул предназначены компоненты пакета:

- ChemSketch – молекулярный редактор двумерных химических структур и графический редактор;
- 3D Viewer – программа моделирования и визуализации трехмерных структур.

1.1. Описание программы ACD/ChemSketch

Общая характеристика редактора ACD/ChemSketch

Химический редактор ACD/ChemSketch (далее ChemSketch) по функциональным возможностям не уступает редакторам ChemDraw и ISIS/Draw и даже кое в чем его превосходит. В отличие от ChemDraw (объем памяти 60 МБ), ChemSketch занимает всего около 20 МБ дискового пространства. Немаловажно и то, что документы, созданные с помощью ChemSketch, занимают небольшой объем — всего несколько килобайт. Этот химический редактор ориентирован на работу с органическими формулами среднего уровня сложности (имеется большая библиотека готовых формул), но в нем удобно составлять также химические формулы неорганических веществ. С его помощью можно изображать молекулы в двух- и трехмерном пространстве, оптимизировать пространственное строение, вычислять расстояния и валентные углы между атомами в молекулярной структуре и многое другое. Программа может сохранять файлы в различных форматах – собственном (*.sk2), документ ChemDraw (*.cdx), эскиз ISIS/Draw (*.skc) и др.

Кроме создания структур "с нуля", в редакторе ChemSketch есть возможность использования достаточно объемной библиотеки готовых формул. Предоставляет редактор и некоторые возможности получения информации по веществам. Оформление документов ChemSketch можно существ-

венно дополнить графическими объектами, надписями. С помощью программы 3D Viewer структуры, созданные в ChemSketch, можно представить в виде наглядных моделей.

Установка, запуск и рабочее окно программы Chems sketch

На сайте компании *acdlabs.com* можно найти как профессиональную, так и бесплатную версии пакета. Бесплатная версия обладает меньшими возможностями, чем платная профессиональная, но потребности студента и преподавателя вуза она во многом удовлетворит. Дистрибутив имеет размер 35 МБ и может быть скачан целиком или, при ненадежном соединении, по частям. Кроме собственно редактора в пакет входят система программирования ChemBasic, программа просмотра трехмерных моделей молекул ACD/3D Viewer, программа обработки ЯМР-спектров ACD/CHNMR Viewer, руководства по работе с программами.

Программа ChemSketch содержит и инструменты для создания векторных изображений, во многом аналогичных векторному редактору Microsoft Office, поэтому позволяет создавать графические иллюстрации. Создание сложных формул и рисунков облегчается наличием альбома шаблонов, который может пополняться пользователем. Созданные с помощью редактора объекты могут быть сохранены, распечатаны, а также скопированы в Microsoft Word и другие приложения. Полезен будет и встроенный калькулятор, позволяющий рассчитывать многие характеристики веществ, формулы которых создаются в редакторе.

Недостаток данного пакета программ – отсутствие русификации. Это касается и интерфейса, и справочной системы, но химику, даже слабо знающему английский язык, многие функции интерфейса будут интуитивно понятны (особенно работавшему в других химических редакторах). Ввод же кириллицы с клавиатуры редактор поддерживает корректно, хотя могут быть проблемы с открытием файлов с кириллическими именами. В Интернете можно найти неофициальные русификаторы для многих популярных химических программ, в том числе для ChemSketch (например, *twipx.com*, *super-chemistry.narod.ru* и др.).

При установке можно указать папку компьютера, в которой будут расположены файлы программы, и раздел главного меню (по умолчанию ACDLabs), где будет находиться ее ярлык. Для удобства работы можно создать ярлык программы на рабочем столе. После установки пакета программ вы можете запустить редактор следующими двумя способами:

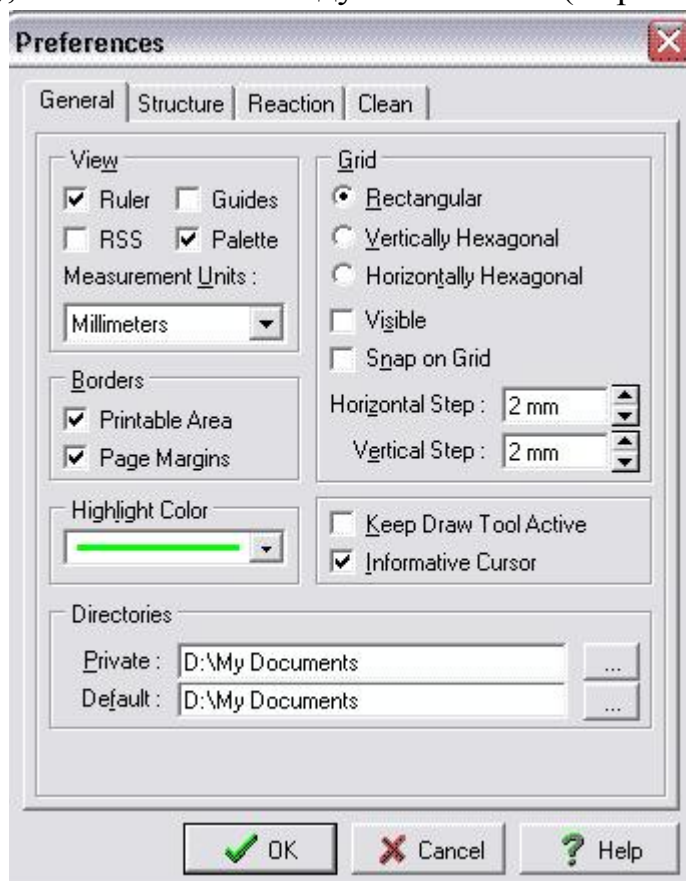
1) в меню **Пуск-Программы** выберите подменю **ACDLabs...** и затем **ChemSketch**;

2) на рабочем столе два раза щелкните левой кнопкой мыши на ярлыке **ChemSketch**.

При первом после установки запуске ChemSketch может открыться диалоговое окно Ассоциации файлов. С помощью этого окна вы установите связь файлов, созданных в ChemSketch, с Windows, благодаря чему впоследствии редактор будет запускаться после двойного щелчка на соответствующем файле. Также может появиться диалоговое окно **Tip of the Day** (Совет дня), которое можно закрыть либо сразу, либо после прочтения рекомендаций. Если пользователь не большой знаток английского языка, можно убрать флажок в окне, чтобы редактор «не надоедал» советами при каждом запуске.

Настройка программы

Установить параметры работы редактора можно, используя меню **Options** (Опции), в частности команду **Preferences** (Параметры).



На вкладке **General** (Общие) можно сделать видимыми или невидимыми некоторые элементы рабочего окна, например, линейки (Ruler), разметку страницы точками (Grid). Здесь можно также установить папки, в которых будут храниться ваши настройки, файлы конфигурации и документы. Если желательно, чтобы документы ChemSketch хранились в особой папке, это можно сделать так:

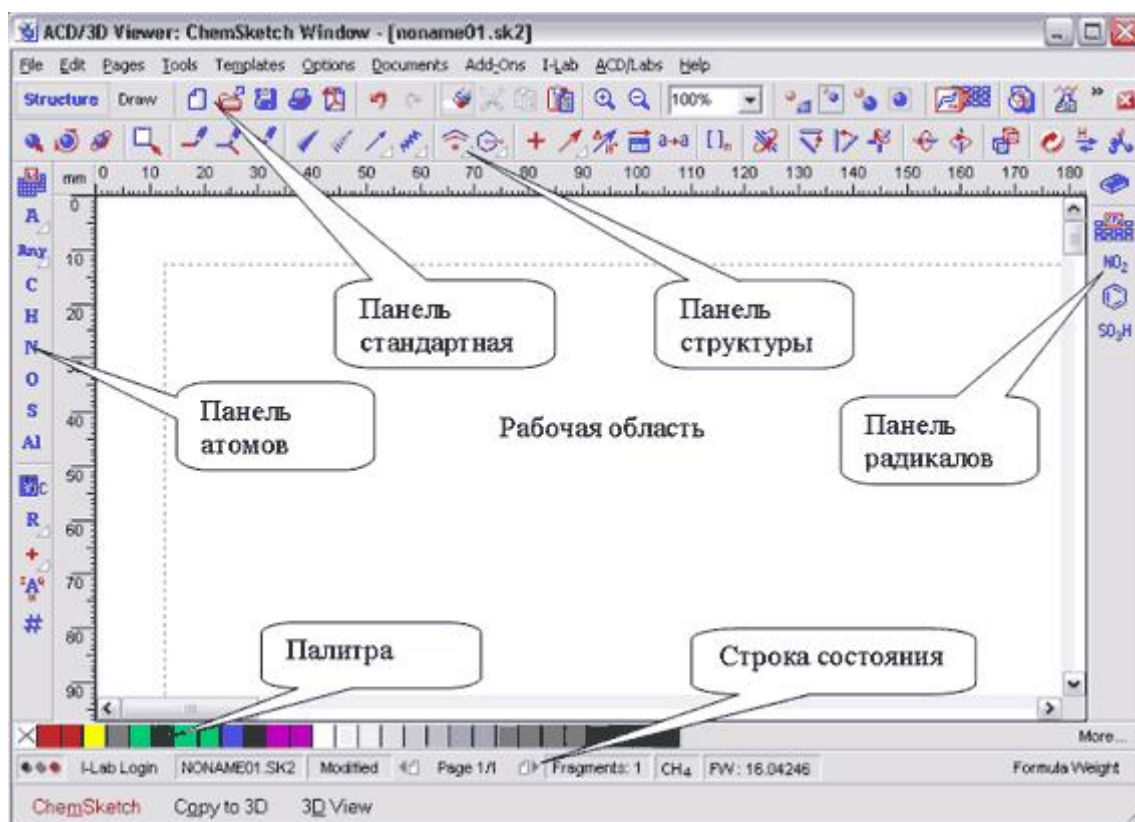
1. В окне ChemSketch выберите меню программы **Options** (Опции), пункт **Preferences** (Параметры);
2. В открывшемся окне выберите вкладку **General** (Общие);
3. В поле **Default** (По умолчанию) укажите папку, в которой будут храниться документы, созданные вами в программе;
4. В поле **Private** (Личный) укажите папку, в которой будут храниться настройки программы, файлы конфигурации и временные файлы.

На других вкладках окна Preferences (**Structure-Reaction-Clean**) можно установить параметры рисования и оптимизации формул, уравнений химических реакций. Начинающему пользователю лучше оставить настройки по умолчанию.

Панели инструментов последних версий ChemSketch можно настраивать, используя контекстное меню.

Редактор ChemSketch представляет собой программу, предназначенную для рисования химических структур и несложных векторных изображений.

Рабочее окно программы содержит строку **Меню** и две панели инструментов (часть команд и кнопок будут доступны, только когда вы начнете создавать формулу):



Стандартная панель инструментов, расположенная ниже панели Меню, содержит кнопки, которые помогут вам быстро выполнить такие привычные команды, как сохранение и открытие файлов, отмену и повтор дей-

ствия, удаление, вырезание и копирование фрагмента, масштабирование, а также ряд специфических команд. На этой панели находятся также кнопки **Structure** (Структура)-**Draw** (Рисование) для переключения режима работы редактора.

Редактор ChemSketch работает в двух режимах: **Structure** (Структура) и **Draw** (Рисование), отличающихся назначением и набором инструментов. Для перехода из одного режима в другой нужно щелкнуть по соответствующей кнопке. Переключение также происходит при нажатии клавиши «пробел».



1.2. Режим редактирования химических формул

В режиме **Structure** (молекулярный редактор), запускаемом по умолчанию, создаются молекулярные и структурные формулы веществ, схемы и уравнения реакций, изображаемые атомы и химические связи являются элементами химической структуры и имеют соответствующие свойства. Режим **Draw** (графический редактор) удобен для ввода текстовых блоков, создания таблиц, схем, выносок, нестандартных графических объектов и для их преобразования, все изображаемые элементы являются частями обычного рисунка.

В режиме **Structure** над рабочей областью находится панель инструментов, содержащая кнопки команд для создания и работы с химическими формулами. В этом режиме доступны таблицы радикалов, шаблоны колец, цепей и функциональных групп и другие инструменты. В режиме **Draw** вместо этой панели активна панель инструментов для работы с графическими объектами.

Панель **Atoms** (Атомы) активна только в режиме **Structure** и расположена слева от рабочей области. Она включает таблицу Д.И.Менделеева, кнопки, отображающие атомы, и инструменты для записи свойств атома (заряд, валентность, номер и т.д.). В режиме **Draw** вместо этой панели активна панель **Autofigures** (Автофигуры).

Рассмотрим более подробно особенности работы в режиме **Structure**.

Панель **Radicals** (Радикалы) расположена справа от рабочей области. Содержит таблицу радикалов, состоящую из различных кнопок, представляющих собой готовые радикалы. По мере работы на панели появляются новые кнопки, отвечающие используемым радикалам.

Рабочая область представляет собой заготовку страницы. Документ ChemSketch состоит из одной или нескольких страниц, которые можно создавать, копировать, удалять, используя команды меню **Pages** (Страницы). Так, команда меню **Pages-New** (Страницы-Новая) добавляет новую страницу в документ. В строке состояния указываются общее число страниц, но-

мер рабочей страницы, и есть кнопки для перехода со страницы на страницу.

Под рабочей областью расположена **Palette** (Палитра цветов), и строка состояния, которая содержит справочную информацию: название создаваемого (редактируемого) файла, номер страницы в файле, число химических структур в рабочей области, молекулярную формулу и массу выделенного фрагмента структуры.

Создание углеводородных структур

Формулы соединений создаются в режиме **Structure**. Основой формулы органического соединения является углеводородная структура. Для ее рисования в редакторе есть три инструмента:

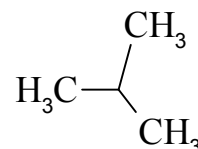


Draw Normal (Обычное рисование), **Draw Continuous** (Непрерывное рисование) и **Draw Chains** (Рисование цепей). Чтобы рисовать именно углеводородные структуры, кроме выбора инструмента надо выбрать на панели атомов символ атома углерода.



Draw Normal является инструментом по умолчанию при запуске ChemSketch. В этом режиме можно легко нарисовать нормальную или разветвленную углеводородные цепи, а также заменить атом углерода на любой другой атом из периодической таблицы. Инструмент **Draw Normal** при каждом щелчке на свободном месте страницы создает формулу метана CH_4 . При протягивании создает формулу этана с произвольной длиной углерод-углеродной связи. При щелчке на существующем углеродном атоме создает разветвление, присоединяя метильную группу $-\text{CH}_3$ со стандартной длиной связи.

Молекула изобутана, построенная в 4 клика:



Последовательно щелкая на концевых атомах углерода можно создавать сколь угодно большие углеводородные структуры. При этом обычно показаны только концевые (*terminal*) атомы углерода. Внутренние атомы углерода (и связанные с ними атомы водорода) представлены узлами ломаной линии или точками их соединений и становятся видны лишь при наведении курсора.



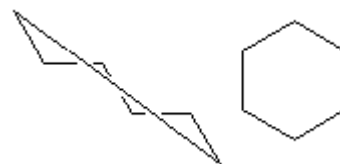
Инструмент **Draw Continuous** при щелчке на свободном месте страницы создает формулу метана CH_4 . При каждом следующем щелчке на свободном месте удлиняет цепь, присоединяя новую группу $-\text{CH}_3$ к предыдущему атому углерода. При этом создаются структуры с произвольными длинами связей и произвольным расположением атомов C-C. При щелчке

на существующем углеродном атоме он становится активным, и дальше цепь будет продолжаться от него. Этот режим очень удобен для рисования новых атомов из выделенного атома. Двойной щелчок создает стандартное разветвление, присоединяя метильную группу $-CH_3$ со стандартной длиной связи. Инструментом **Draw Continuous** удобно рисовать циклы, при этом, чтобы замкнуть цикл, последний щелчок делают на первом атоме углерода.



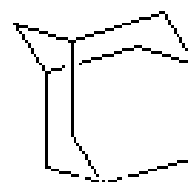
Инструмент **Draw Chains** при щелчках ведет себя как инструмент **Draw Normal**, но при протягивании рисует стандартную углеводородную цепочку в виде зигзагообразной линии. Особенностью этого инструмента является то, что все связи располагаются под углом в 120° . Но если зажать клавишу **Ctrl** во время рисования цепи с помощью этого инструмента, то связи будут расположены друг к другу под углом 180° . Рядом с указателем курсора появляется число, показывающее число атомов углерода в цепочке. Цепочку можно начать и от любого существующего атома углерода.

Для циклов с большим числом атомов углерода с помощью инструмента **Draw Chains** рисуют цепочку с нужным числом атомов углерода, затем, используя **Draw Normal**, соединяют первый атом с последним.

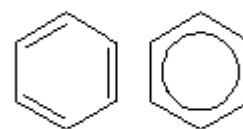


В результате получают неоптимизированные циклы, состоящие из одних линий. Чтобы представить их в правильном виде, используют инструмент **Clean Structure**.

У любого углеродного атома цикла можно создать разветвление (боковую цепь) и, замкнув его в цикл, создать структуру с конденсированными циклами, например, структуру углеводорода адамантана $C_{10}H_{16}$. При желании можно развернуть атомы водорода циклической структуры.



Обычными приемами связи цикла можно преобразовать в двойные или тройные (атомы водорода предварительно надо свернуть). В результате шестиатомный цикл циклогексана можно превратить в формулу Кекуле для молекулы бензола.



Для преобразования формулы Кекуле в ароматическую структуру используется команда меню **Tools - Show Aromaticity** (показать ароматичность), обратная операция выполняется командой **Hide Aromaticity**.

Если необходимо укоротить цепь, можно удалить по одному атомы углерода и, следовательно, метильные или метиленовые и другие группы.

Для этого нажмите кнопку **Delete** (Удалить)  на стандартной панели инструментов и щелкайте мышью последовательно по тем атомам, которые вы хотите удалить. При необходимости можно использовать кнопку **Undo** (Отменить). Пример работы инструмента **Delete**:



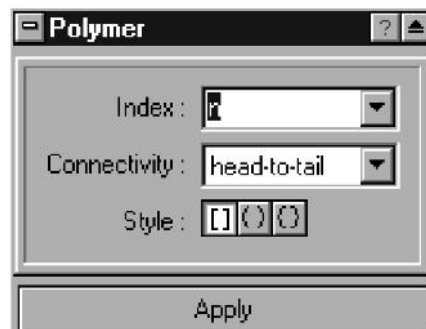
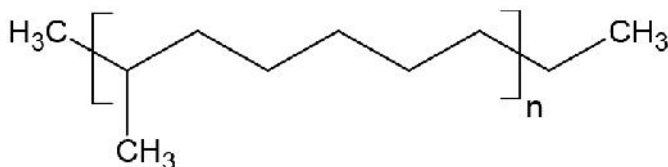
Кратные связи

Любой из инструментов рисования при щелчке на линии связи преобразует одинарную связь в двойную, затем – в тройную и снова в одинарную. В соответствии с изменением кратности связи изменяется число атомов водорода. Если кликнуть по уже существующей тройной связи – она снова станет одинарной. Кратная связь не будет создана, если этому препятствует разветвление у атома углерода, а также, если формула развернута полностью.

Рисование полимеров

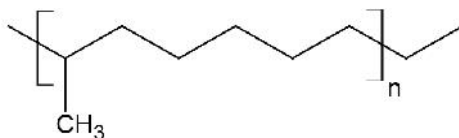
ChemSketch имеет возможности для рисования полимеров. Для этого на **Structure toolbar** (панели инструментов для структур) выберите инструмент **Polymers**  для отображения **Polymer panel** (панели для полимеров) и установите настройки, как показано здесь:

Затем выберите область, которую необходимо превратить в полимер с помощью клика мышкой или перетаскивания. После выбора области можно увидеть следующего вида изображение:



Псевдоатомы

Для того чтобы создать полимер, на концах которого нет углеродных атомов, необходимо на панели инструментов для атомов кликнуть **Pseudo Atom** . После этого нажмите на концевые атомы полимерной структуры для того чтобы заменить их на «пустые» атомы, после чего получится полимер с «открытыми» концами:

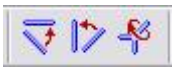


Преобразование вида структур

Вид созданных структуры можно изменять, перемещая их, вращая, изменяя положение атомов и групп атомов, длины связей, размеры структуры в целом, с помощью инструментов панели **Structure**.

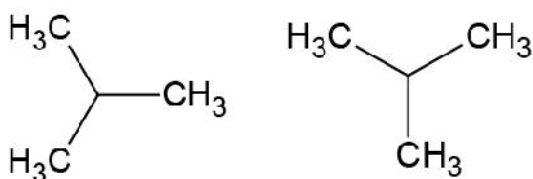
Для перемещения формулы или ее элементов используется инструмент **Select/Move** (Выбор/Перемещение). После этого можно взяться за любой символ или линию связи и изменить их положение на листе. Можно обвести рамкой часть структуры или структуру полностью – затем мышкой переместить выбранное на новое место.

Инструмент **Select/Size/Rotation**  (Выбор/Размер/Вращение) позволяет вращать формулу в плоскости, взявшись за один из атомов. Если обвести формулу (или ее фрагмент) рамкой, появятся маркеры изменения размеров. Наконец, инструмент **3D Rotation** позволяет имитировать вращение формулы в пространстве.

Следующая группа инструментов  позволяет изменить положение формулы по выбранной связи. Если нужно, чтобы формула была повернута так, чтобы некоторая связь стала вертикальной, следует:

- 1) выбрать инструмент **Set Bond Vertically** (установить связь вертикально);
- 2) щелкнуть мышью по линии требуемой связи.

Пример работы инструмента **Set Bond Vertically**:



Аналогично работают кнопки **Set Bond Horizontally** (установить связь горизонтально) и **Flip on Bond** (отразить по связи).

Кнопки **Flip**  (отражения сверху вниз и слева направо) требуют предварительного выделения нужной структуры или ее фрагмента. Если это не сделано, произойдет отражение всего содержимого страницы.

Кнопка **Change Position**  позволяет изменить положение символов атома водорода относительно углеродного атома структуры.

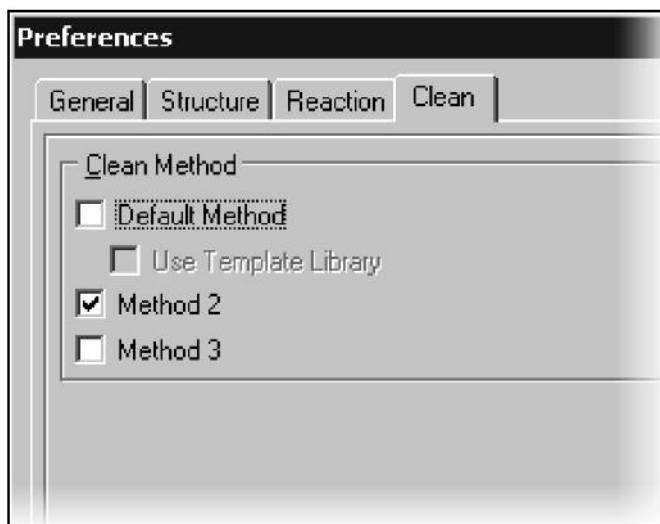
Ручное изменение формы структуры может привести к нежелательным результатам. Чтобы быстро перейти к стандартной структуре, можно

использовать инструмент **Clean Structure**  («очистка» или «стандартизация» структуры) – по существу это двухмерная оптимизация структуры – выравнивание длин связей и углов.

Нужно сделать более презентабельной молекулу следующего вида:

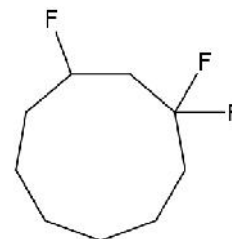


Для того чтобы сделать стандартными все углы и длины связей в нарисованной структуре, необходимо в меню **Options** (Опции) выбрать **Preferences** (Параметры) и в открытой вкладке **Clean** диалогового окна **Preferences** поставить галку напротив метода 2:



Далее на панели инструментов для структур (StructureToolbar) щелкните **Clean Structure** .

Команда **Clean Structure** не только делает стандартными все длины связей и углы для того, чтобы сделать структуру опрятно выглядящей, но также с помощью неё нарисованные структуры преобразуются в более химически корректные. Например, для ациклических фрагментов она размещает связи sp^2 близко к углу 120° , а для sp – близко к углу 180° .



Есть и инструмент трехмерной оптимизации **3D Optimisation**. При проведении этой операции происходит полное разворачивание формулы.

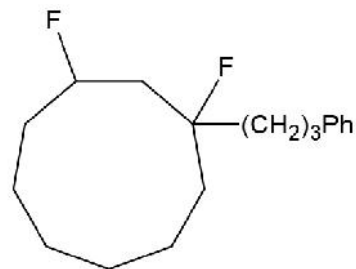
Развернуть (свернуть) атомы водорода в углеводородной структуре можно, используя команды меню **Tools: Add Explicit Hydrogens** и **Remove Explicit Hydrogens**. Если на листе не выделен ни один фрагмент, разворачиваются все структуры листа.

Редактирование меток атомов (Atom labels)

Команда **Edit Atom Label** позволяет заменить концевой атом или группу на короткую буквенную аббревиатуру. Для того чтобы это сделать,

на панели **Atoms toolbar** выберите значок  и затем кликните по крайнему правому атому фтора в нарисованной структуре.

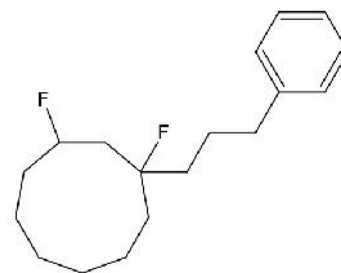
Затем в диалоге **Edit Label** наберите $(CH_2)_3Ph$ и нажмите **Insert** (Вставить). Группа вставляется в указанную позицию, и при этом все индексы автоматически пишутся подстрочным текстом.



Если вы хотите, чтобы конец молекулы был развернутым, кликните для этого снова по

инструменту **Edit Atom Label** , а затем по полученной краткой аббревиатуре для того, чтобы открыть диалоговое окно **Edit Label**. После этого

кликните **Expand** , появится структура следующего вида:



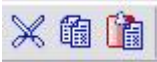
Очищение экрана

Если нужно очистить экран, то можно это сделать одним из следующих способов:

- Из меню **File** выберите строку **New**. Эта операция откроет новый пустой документ;
- Через меню **Edit** выберите строку **SelectAll** и затем в этом же меню щелкните **Delete**;
- Нажмите **Ctrl+A** для того, чтобы выбрать все объекты на странице, и затем нажмите кнопку **Delete**;

– На главной панели инструментов выберите **Delete** . Щелкните по пустому месту, на котором нет нарисованных структур, для того чтобы все выделить, и затем щелкните по любому рисунку для того, чтобы очистить все рабочее пространство.

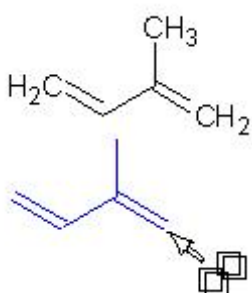
Копирование структур. Мгновенный шаблон

Выделенную структуру можно копировать в буфер, используя команду меню **Edit - Copy**, сочетание клавиш **Ctrl+C** или кнопки панели инструментов . Скопированную структуру можно вставить обычными способами в документы других программ, например, в документ **WORD**, а также на любую страницу документа **ChemSketch**.

При выполнении вставки в **ChemSketch** (**Edit - Paste**, **Ctrl+V** или кнопкой) к курсору прикрепляется шаблон структуры. При щелчке на нуж-

ном месте страницы появляется копия структуры. Копировать структуры можно также перетаскиванием их при нажатой клавише Ctrl.

В ChemSketch существует еще один способ копирования структур – создание на их основе мгновенного шаблона.



Для этой операции на панели инструментов есть кнопка **Instant Template** (Мгновенный шаблон)

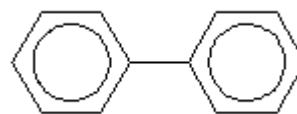


. Щелкнув по этой кнопке, нужно затем щелкнуть по одному из атомов или по одной из связей выбранной структуры.

Шаблон структуры прикрепляется к курсору и может быть использован для вставки копий структуры столько раз, сколько это необходимо. Чтобы "отцепить" шаблон от указателя мышки нужно нажать правую кнопку мышки или клавишу Esc.

Мгновенный шаблон можно использовать не только для копирования структур, но и для их достройки. При этом имеет значение, за какой атом или за какую связь взят шаблон, поскольку именно по этой связи или по этому атому шаблон присоединится к другой структуре. Так, чтобы из формулы бензола получить формулу дифенила, нужно:

- 1) щелкнуть по кнопке **Instant Template**;
- 2) щелкнуть по одному из **атомов** в формуле бензола (взять шаблон по атому);



- 3) подвести курсор к одному из **атомов** в этой же или другой формуле бензола и щелкнуть - фенильные кольца соединятся новой связью C-C.

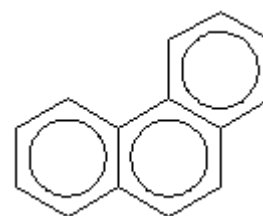
Если же из формулы бензола надо получить формулу нафталина, то нужно:

- 1) щелкнуть по кнопке **Instant Template**;
- 2) щелкнуть по одной из связей в формуле бензола (взять шаблон по связи);
- 3) подвести курсор к одной из связей в этой же или другой формуле бензола и щелкнуть - фенильные кольца соединятся по этой связи, образовав конденсированную структуру нафталина.

Следует учитывать, что при объединении по связям ароматических структур может происходить потеря ароматичности. Кроме того, могут возникнуть структуры с пятивалентным атомом углерода. Такие «неправильные» атомы отмечаются как ошибочные перечеркиванием их крестиком.

Чтобы избежать таких проблем можно поступать следующим образом:

- убрать ароматичность и кратные связи из исходных структур;
- объединить структуры;
- заново расставить кратные связи и показать ароматичность (меню **Tools - Show Aromaticity**).



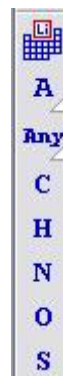
Заместители и гетероатомы

Чтобы от углеводов перейти к формулам других классов органических соединений необходимо научиться вводить в формулу символы других химических элементов. Для этого используются те же инструменты рисования, только их нужно предварительно "зарядить" символом нужного элемента, щелкнув по этому символу на панели **Atom Toolbar**. Вместо символа конкретного элемента можно выбрать условное обозначение некоторого атома (кнопка **Any Atom**).

Если символа нужного элемента нет на панели, можно открыть



Periodic Table (периодическую таблицу).



Periodic Table of Elements

1 H	2 He																	18 He
3 Li	4 Be											13 B	14 C	15 N	16 O	17 F	18 Ne	
19 Na	20 Mg											31 Al	32 Si	33 P	34 S	35 Cl	36 Ar	
21 K	22 Ca	23 Sc	24 Ti	25 V	26 Cr	27 Mn	28 Fe	29 Co	30 Ni	31 Cu	32 Zn	33 Ga	34 Ge	35 As	36 Se	37 Br	38 Kr	
39 Rb	40 Sr	41 Y	42 Zr	43 Nb	44 Mo	45 Tc	46 Ru	47 Rh	48 Pd	49 Ag	50 Cd	51 In	52 Sn	53 Sb	54 Te	55 I	56 Xe	
57 Cs	58 Ba	59 *	60 Hf	61 Ta	62 W	63 Re	64 Os	65 Ir	66 Pt	67 Au	68 Hg	69 Tl	70 Pb	71 Bi	72 Po	73 At	74 Rn	
75 Fr	76 Ra	77 **	78 Rf	79 Db	80 Sg	81 Bh	82 Hs	83 Mt	84 Ds	85 Rg								
		87 La	88 Ce	89 Pr	90 Nd	91 Pm	92 Sm	93 Eu	94 Gd	95 Tb	96 Dy	97 Ho	98 Er	99 Tm	100 Yb	101 Lu	102 D	
		103 Ac	104 Th	105 Pa	106 U	107 Np	108 Pu	109 Am	110 Cm	111 Bk	112 Cf	113 Es	114 Fm	115 Md	116 No	117 Lr	118 T	

Characters: green-yellow gas, poisonous
 Discoverer: 1886, H. Moissan, France
 Name Origin: from 'fluere' (Latin) - to flow
 Atomic Radius, Å: 0.67
 Ionization Potential, kJ/mol: 1681
 Electronegativity: 3.98
 Electron Affinity, kJ/mol: 328
 Density, g/L: 1.7
 Melting Point, K: 54
 Boiling Point, K: 85

General NMR Mass Coloration

OK Cancel Help



В таблице выбрать символ, например, **фтор** и нажать ОК. При этом он будет размещен и на панели **Atom Toolbar**. Периодическая таблица содержит и краткую информацию о химических элементах (открытие, основные константы, строение атома...).

Существует два способа введения гетероатомов: замена символов углерода на символ другого элемента и присоединение символа элемента к уже существующей структуре.

В первом случае используется инструмент **Draw Normal**. Выбирают символ нужного элемента и щелкают мышкой по тому атому углерода, который необходимо заменить. Атом неметалла при этом дополняется в соответствии с его валентностью необходимым числом атомов водорода. Если число связей превышает валентность, атом вставляется как ион. Этим способом удобно создавать формулы гетероциклов – сначала рисуется углеродный цикл, затем один из атомов углерода заменяется на гетероатом.

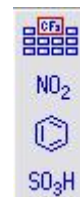
Для добавления символа используется инструмент **Draw Continuous**. Выбирают символ нужного элемента и щелкают мышкой по тому атому углерода, к которому надо присоединить гетероатом. Второй щелчок по этому атому или рядом с ним добавляет в формулу символ неметалла с необходимым числом атомов водорода. Если вставляется символ металла с валентностью больше 1, то он вставляется как катион.

Радикалы и группы атомов

Органические молекулы часто содержат некоторые функциональные группы, рисовать которые каждый раз заново нерационально. Кроме того, некоторые фрагменты сложных формул часто изображают не структурными формулами, а свернутыми ($-\text{NO}_2$, $-\text{C}_2\text{H}_5$) или даже условными обозначениями (Et, i-Pr, Ph). Для ввода таких фрагментов в формулы ChemSketch предлагает два инструмента: **Radicals** (Радикалы) и **Atom Label** (Группы Атомов).

По сути дела это одно и то же, но если **Radicals** вставляются как фрагменты структурных формул, то **Atom Label** – как свернутые формулы или условные обозначения. После вставки группы атомов могут быть развернуты, т.е. превращены в радикалы (обратный процесс невозможен).

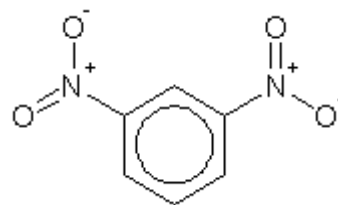
Для вставки радикала необходимо найти его в таблице радикалов. После щелчка по кнопке выбранного радикала шаблон его структуры прикрепляется к курсору и может быть использован как мгновенный шаблон. Использованный радикал появляется на панели радикалов, что позволяет при следующем использовании не искать его в таблице.



Таким образом, чтобы из формулы бензола получить формулу м-динитробензола нужно:

1) выбрать в таблице радикалов шаблон нитро-группы;

2) подвести курсор к одному из атомов в формуле бензола и щелкнуть – радикал соединится с этим углеродным атомом;



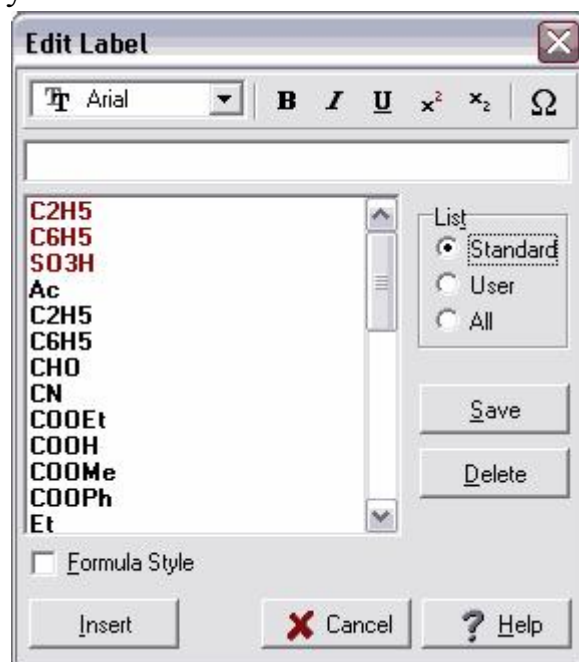
3) повторить эту операцию для второго углеродного атома в *meta*-положении к первому.

Группа атомов в ChemSketch не очень понятно называется **Atom Label** ("атомная метка", "атомная этикетка"). Инструмент для редактирования и вставки группы находится на панели **Atoms** – кнопка **Edit Atom Label**. Для добавления группы атомов нужно:

1) щелкнуть по кнопке **Edit Atom**

Label

2) кликнуть по атому в структурной формуле, который должен быть заменен на группу или по свободному месту страницы рядом с формулой. При этом открывается диалоговое окно **Edit Label**. В этом окне:



3) выбрать в имеющемся списке формулу нужной группы атомов или ее условное обозначение, при этом выбранное появляется в окне редактирования;

4) если нужной формулы нет, ввести ее в окне редактирования, при этом индексы вводятся в строку (специальная кнопка позволяет вводить буквы греческого алфавита);

5) при желании – указать параметры форматирования, которые нужно применить к этой формуле;

6) при желании – сохранить формулу для ее последующего использования, нажав кнопку **Save**;

7) нажать кнопку **Insert** (Вставить);

8) если группа вставлена рядом с формулой, соединить ее с нужным атомом в формуле, используя инструмент **Draw Continuous**. Иногда при этом нужно поменять порядок атомов в группе с помощью кнопки **Change**

Position

Чтобы развернуть группу атомов нужно:
– щелкнуть по кнопке **Edit Atom Label**;

- щелкнуть по формуле или условному обозначению группы атомов, при этом вновь открывается диалоговое окно **Edit Label**;
- в этом окне нажать кнопку **Expand** (Развернуть).

Кнопка **Expand** будет отсутствовать, или развернуть группу атомов не удастся, если:

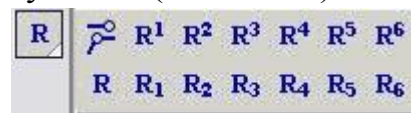
- группа не соединена со структурой или соединена неверно;
- формула группы составлена неверно, например, с использованием букв русского алфавита вместо латинских;
- формула слишком сложна или использованы условные обозначения, не заложенные в программу.

При составлении и редактировании формул групп атомов можно дополнительно использовать символы:

'~' (тильда) отрицательный заряд; '+' положительный заряд; '-' одинарная связь (может быть опущено); '=' двойная связь; '%' (процент); '≡' тройная связь; '(' ')' (скобки) повторяющаяся группа атомов.

Если группу атомов снова нужно будет представить в свернутом виде, ее придется вводить заново или использовать кнопку **Undo** (Отменить).

Есть в ChemSketch и инструмент позволяющий вводить условные обозначения радикалов типа R, R₁ и т.п. - кнопка **Radical Labels**.



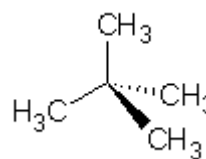
Особые виды связей

Кроме ординарных, двойных и тройных связей, в формулах химических соединений может возникнуть необходимость изобразить и другие связи: координационные, водородные, полуторные... Еще одна проблема возникает, когда необходимо показать положение связей в пространстве. Нарисовать пространственные формулы и особые виды связей помогает еще одна группа инструментов ChemSketch.

Кнопки **Up Stereo Bonds** и **Down Stereo Bonds**



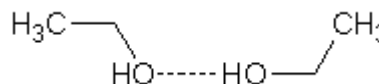
позволят превратить обычную формулу в пространственную. Чтобы это сделать, надо выбрать одну из них,



затем кликнуть по связи, направленной соответственно к зрителю или от зрителя. Связи, лежащие в плоскости листа, при этом оставляют без изменения.

Последовательно щелкая по стерео-связи можно изменить ее вид, но изобразить двойную, тройную связь не удастся. Поменять инструменты **Up** на **Down** и обратно можно, щелкнув правой кнопкой мышки по пустой части листа. Чтобы вернуться к нормальному режиму рисования щелкните **Draw Normal**.

Донорно-акцепторные, водородные, координационные связи показыва-ются стрелками и пунктирными линиями. Для их рисования служит кнопка **Coordinating Bonds** . В углу этой кнопки имеется светлый тре-угольник, щелчок по которому открывает дополнительную палитру, позво-ляющую выбрать нужный тип линии или стрелки. Выбрав нужный инстру-мент, можно нарисовать связь, проведя линию от одного атома до другого. Можно также нарисовать нужный тип связи в пустое пространство, при этом в конце связи будет добавлен атом, который был активен на палитре атомов (затем его можно будет заменить). Можно, наконец, заменить одну из связей в нарисованной структуре, просто щелкнув выбранным инструментом по линии связи.



Последовательно щелкая по связи, можно изменить направление стрелки, а чтобы вернуться в обычный режим, нужно щелкнуть правой кнопкой мышки по пустой части листа или щелкнуть кнопку **Draw Normal**.

Аналогично работают с кнопкой **Special Bonds** , которая позволя-ет выбрать еще несколько способов изображения химических связей. Вид кнопки (и ее подсказка) будет меняться в зависимости от выбранного инст-румента.

Рисование сложных структур

Использование таблицы радикалов

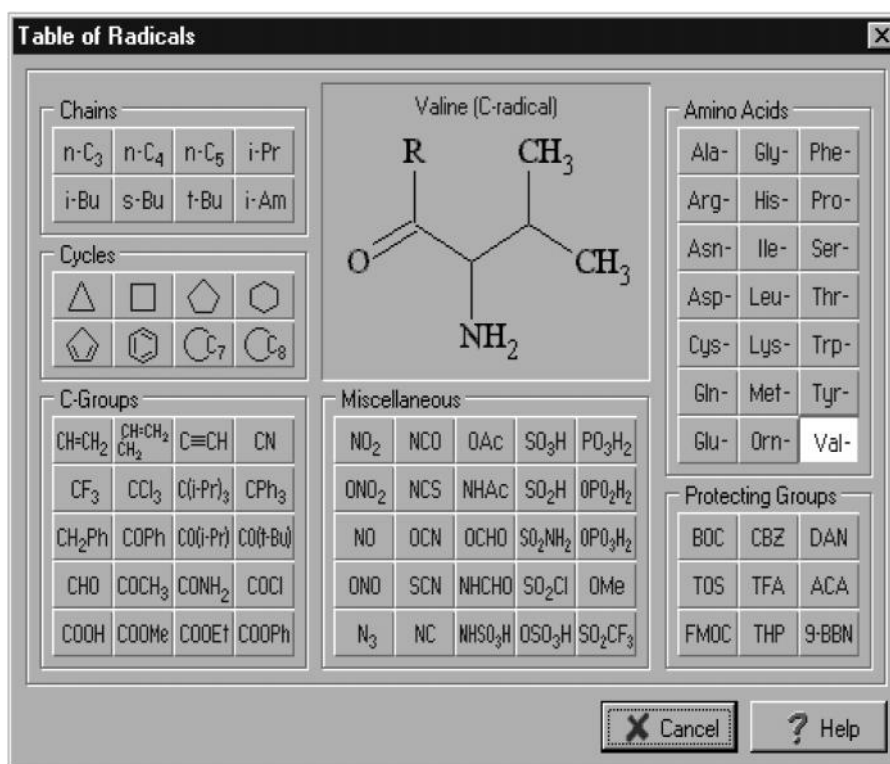
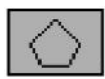


Таблица радикалов включает себя шаблоны-зарисовки аминокислот, их нуклеотидов и других часто используемых радикалов. На **References toolbar** (панели инструментов для предустановок) кликните таблицу радикалов (Table of Radicals)  для отображения радикалов.

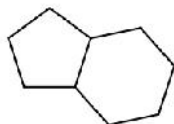
Нажмите на циклогексан  – кнопка циклогексана после этого будет размещена на **References toolbar** с правой стороны экрана. Повторите то же самое для цикlopентана  и карбоксила .

Использование кольцевых структур

Нарисуем гексадекагидроциклопента[с]-фтор-3,4,5,7,8,9-гексакарбок- сильную кислоту.

Для этого на панели радикалов выберите цикlopентан . Кликните по рабочему пространству для того, чтобы вставить пятичленное кольцо. После этого на той же панели инструментов выберите циклогексан .

Теперь кликните мышью на показанную на рисунке связь для того, чтобы создать следующую структуру:



Повторите эти шаги до создания следующей структуры:



На панели инструментов **Structure toolbar** кликните значок **Set Bond**

Vertically , затем кликните по нужной связи, чтобы повернуть структуру относительно этой связи вертикально:

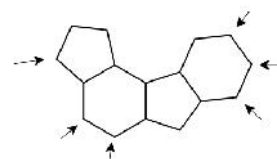
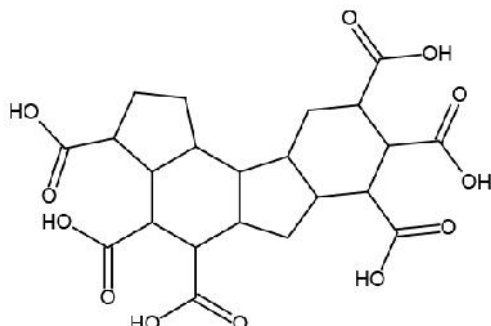


После этого на панели инструментов **References toolbar** нажмите на



карбоксил

Кликните на указанные атомы для того, чтобы добавить карбоксильные группы. У вас получится вот это:



Удаление нескольких атомов одновременно

Для этого выберите на панели инструментов **Lasso On/Off**



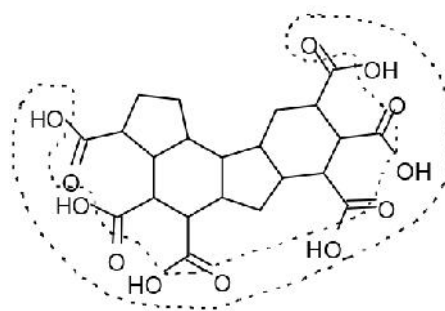
для того, чтобы включить режим работы **Lasso**



При этом пункт **Select/Move**



становится активным. После этого выделите мышкой все отмеченные на рисунке атомы так, чтобы создать замкнутый контур:



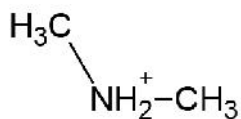
На главной панели инструментов нажмите **Delete**



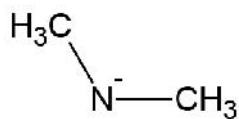
и кликните на любой выделенный атом, чтобы удалить их все одновременно.

Установка зарядов на молекулы, катионы и анионы

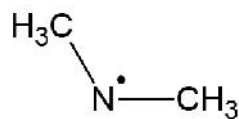
Попробуем создать структуры, имеющие заряды.



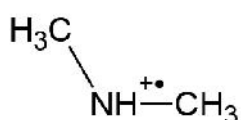
cation



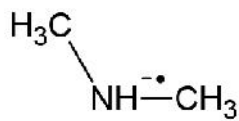
anion



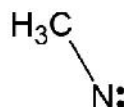
free radical



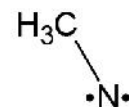
positive radical ion



negative radical ion

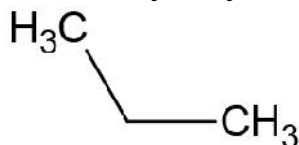


singlet biradical

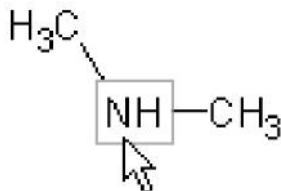


triplet biradical

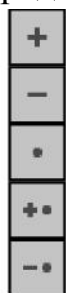
Сначала нужно нарисовать следующую структуру:



После этого на панели **Atoms toolbar** выбрать азот  и заменить им углерод в середине молекулы, как показано ниже:



Далее на панели **Atoms toolbar** кликнуть по утопленному треугольнику кнопки **Increment (+) Charge**  для того, чтобы расширить меню зарядов. Появится это:



Increment (+) Charge

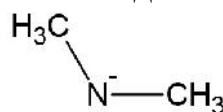
Decrement (-) Charge

Radical

Positive Radical Ion

Negative Radical Ion

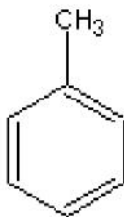
Выберите **Decrement (-) Charge**  для создания отрицательного заряда и затем кликните по NH-группе чтобы создать анион:



Другие заряды рисуются аналогично.

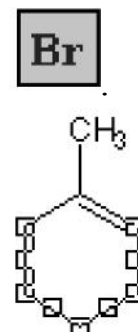
Связи Маркуша

Для того чтобы обозначить структуры со связью, местоположение которое не определено, используйте один из инструментов для обозначения связей Маркуша. Для этого нарисуйте сначала следующую структуру:



После этого на панели инструментов **Atoms toolbar** нажмите .

Далее с помощью инструмента **Select/Move**  выберите пять нижних атомов структуры, как показано:



Далее на панели инструментов **Structure toolbar** нажмите либо на

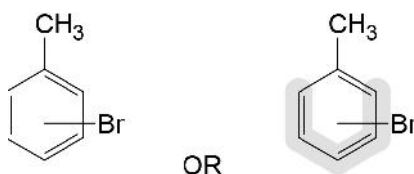
Markush Bond



(связь Маркуша), либо на **Markush Bond with**



Shadow (связь Маркуша с тенью). Появляется выбранный элемент, связанный с остальной структурой связью Маркуша.



Рисование стереоизомеров

Для того чтобы нарисовать стереосвязи, нажмите на панели для структур **Structure toolbar** инструмент **Up Stereo Bonds**

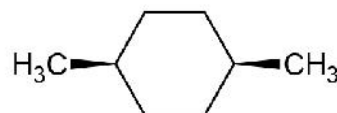
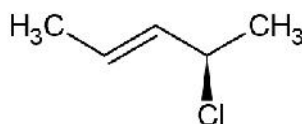
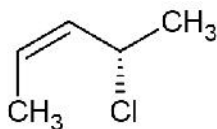


или **Down**

Stereo Bonds



. Затем измените уже имеющуюся связь в структуре с помощью клика мышью по связи:

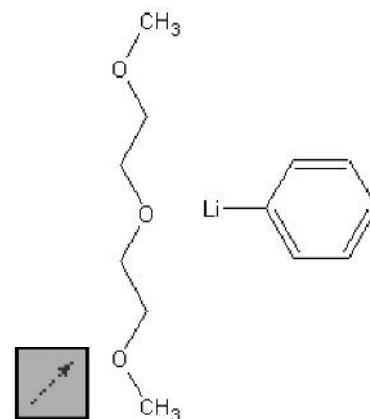


Рисование координатных связей

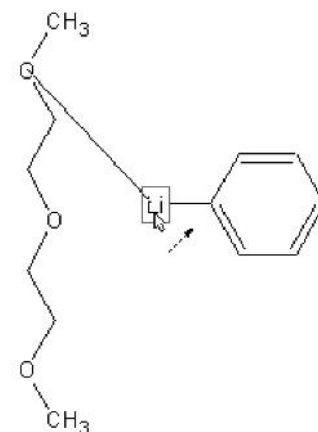
Нарисуйте для начала следующие структуры:

После этого на панели инструментов для структур **Structure Toolbar** нажмите на белый треугольник на кнопке **Coordinating**

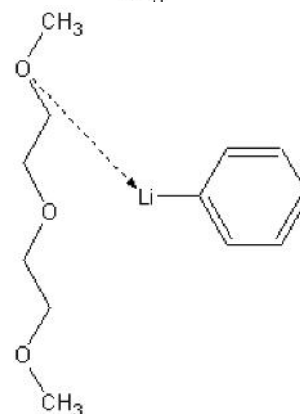
Bonds и выберите кнопку **Coordinating (Dashed Arrow) Bonds**



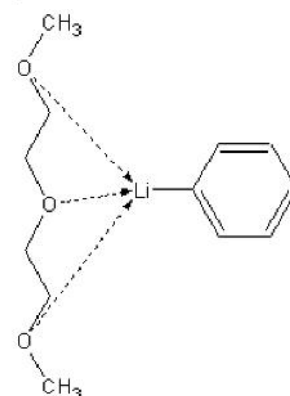
Далее протяните мышкой связь от атома кислорода к атому лития, как показано на рисунке:



Когда отпустите кнопку мыши, структура станет выглядеть так:



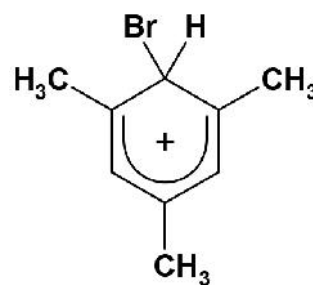
Повторите действия для того, чтобы получить следующую структуру:



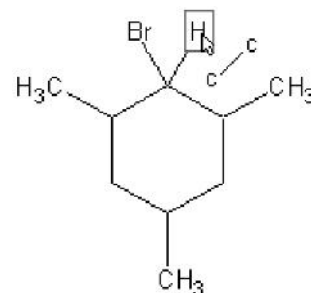
Делокализованные заряды и кривые

Делокализованные связи и заряды используются для того, чтобы изобразить промежуточные интермедиаты в реакциях и делокализованные заряды.

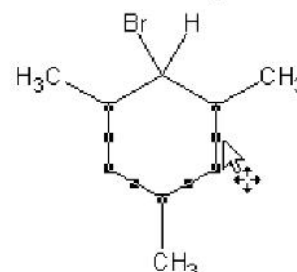
Чтобы попрактиковаться в изображении таких связей, нарисуем вот такую структуру:



Для начала сделаем заготовку:

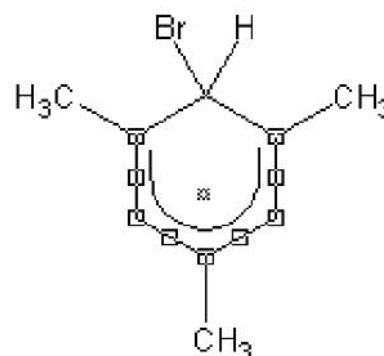


Теперь активируем инструмент **Select/Move**  и выделяем атомы, как показано на рисунке:

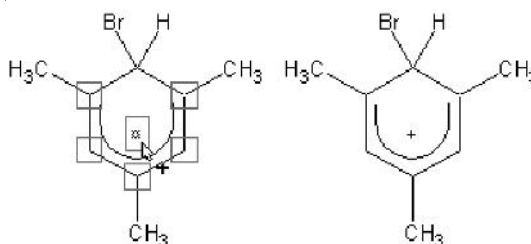


После этого на панели инструментов для структур нажимаем **Solid Delocalization**

Bond  и применяем выбранный тип связи.



Далее нажимаем значок **Increment (+)Charge**  на панели инструментов для атомов **Atoms toolbar**, указываем на центр делокализованной связи так, чтобы появилось выделение, и щелкаем правой клавишей мыши, чтобы изменить заряд на плюс:



Библиотека шаблонов

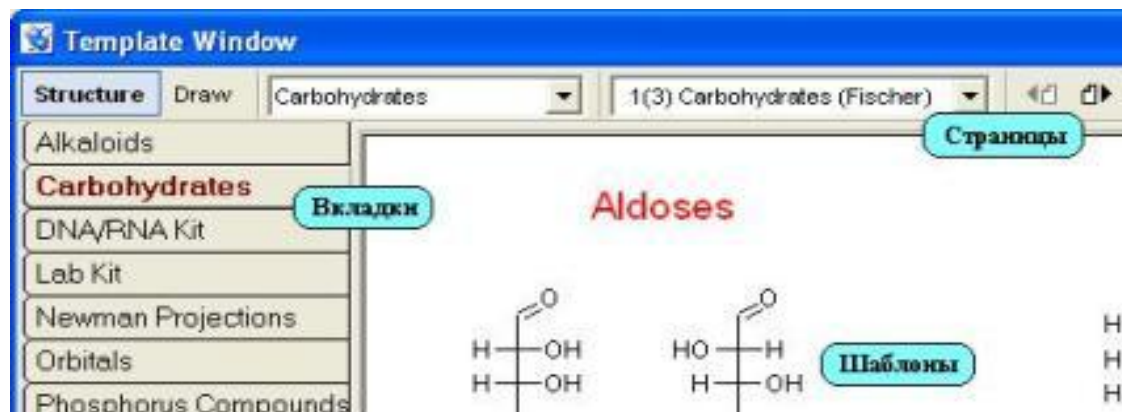
Создание сложных формул даже в специализированном редакторе требует большой затраты времени. Для облегчения этой работы химический редактор ChemSketch содержит библиотеку готовых шаблонов наиболее сложных структурных формул, а также других рисунков, которые могут понадобиться в работе химика.

Для открытия окна библиотеки используются раздел меню **Templates**



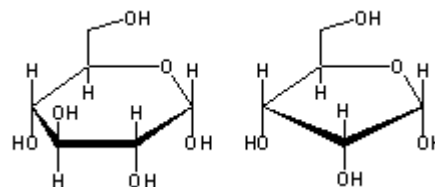
(Шаблоны), клавиша **F5**, или специальная кнопка на основной панели инструментов.

Окно **Templates** содержит ряд вкладок, каждая из которых может состоять из нескольких страниц шаблонов. Шаблоны активной страницы представлены в основной части окна.



Чтобы использовать любой из шаблонов, достаточно кликнуть по нему мышкой. При этом окно **Templates** закроется, и курсор с прикрепленным шаблоном перейдет в рабочую область редактора. Там скопированную структуру можно вставить щелчком мышки столько раз, сколько это необходимо. Взятые из библиотеки шаблонов формулы можно далее редактировать обычными приемами.

Ниже представлены фуранозная и пиранозные формы глюкозы, скопированные с вкладки **Carbohydrates** (Углеводы). Различные варианты формулы моносахаридов представлены на вкладке **Sugars**: α -D-Pyr, β -D-Pyr, α -D-Fur, β -D-Fur.



В качестве шаблона можно сохранить свой файл. Для этого в меню вкладки **Templates** нужно выбрать пункт **Save User Template** (Сохранить пользовательский шаблон). Чтобы сохранить в качестве шаблона неоткрытый файл, воспользуйтесь **Template Organizer** (Организатор шаблонов).

Характеристики молекул

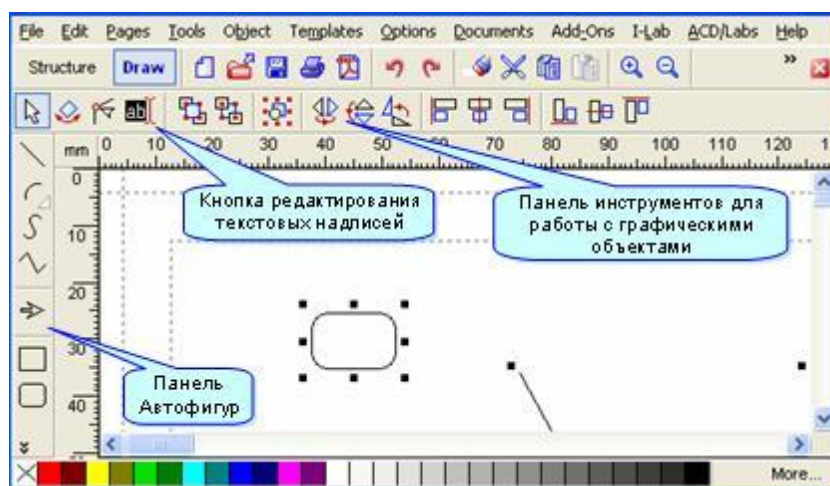
ChemSketch позволяет определять и выводить на лист редактора надписи, содержащие основные характеристики молекул. Так, в строке состояния показываются молекулярная формула соединения и его молекулярная масса (FW - Formula Weight). Если формул на листе много, показываются суммарные характеристики, и нужно выделить определенную структуру.

С помощью меню **Tools - Calculate** (Инструменты-Рассчитать) можно получить различные характеристики соединения и нажатием кнопки **Copy**

to **Editor** (Копировать в редактор) перенести их на лист. Полученные надписи можно мышкой передвигать на любое удобное место страницы.

Используя команду меню **Tools-Generate Name from Structure** (Инструменты-создать название структуры), можно получить название соединения по международной номенклатуре на английском языке. Разумеется, возможности программы ограничены, и для очень сложных структур не вся информация будет доступна.

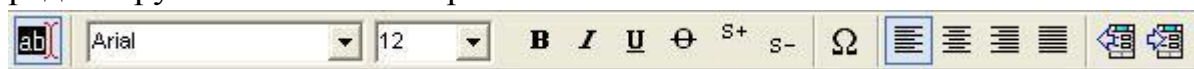
1.3. Режим Draw (Рисование)



Этот режим позволяет работать в редакторе с графическими и текстовыми объектами. Для перехода в режим **Draw** (Рисование) надо нажать соответствующую кнопку на основной панели инструментов. При этом появляются новые панели инструментов: для создания автофигур и надписей и для работы с уже имеющимися графическими объектами.

Редактирование и создание надписей

Для изменения существующей надписи ее надо выделить, и на панели инструментов нажать кнопку  **Text Edit** (Редактирование текста). При этом панель инструментов снова изменится, там появятся необходимые поля и кнопки, а в рамке надписи появится курсор. После этого текст надписи редактируется обычными приемами.



Дополнительные возможности форматирования надписей возможны при двойном щелчке мышкой по надписи, а также через меню **Tools-Update Object Style Panel**. При этом открывается панель для установки различных параметров надписи. Параметры отдельных фрагментов текста можно изменить, вызвав **Tools-Font Panel** (Шрифт) и **Tools-Paragraph Panel** (Абзац).

ACD/ChemSketch использует два типа надписей: с обычным (**plain**) форматировемым текстом и **Artistic text**. Если надпись создана с атрибутом

Artistic text, то размер шрифта будет автоматически изменяться при изменении размеров надписи.

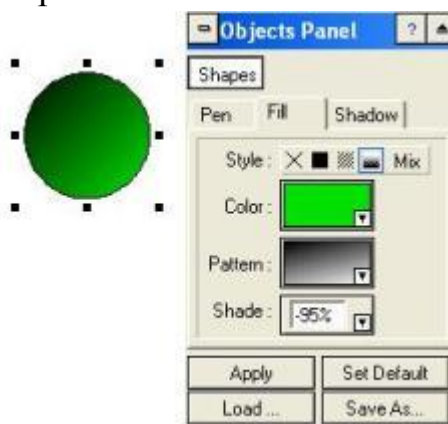
Для создания новых надписей на панели Автофигуры выберите инструмент **Text** (Надпись) . Маленький уголок на кнопке позволяет сделать выбор: обычная надпись или в стиле **Artistic text**. Затем щелкните мышкой в нужном месте страницы и можете вводить текст. Вертикальные границы надписи можно раздвигать мышкой, а горизонтальные раздвигаются автоматически, по мере появления новых строчек текста.

Создание графических объектов

Для создания графических объектов могут быть использованы различные инструменты с панели автофигур: **Line** (Линия), **Arc** (Дуги), **Curve** (Кривая), **Polyline** (Ломаная), **Arrow** (Стрелка), **Rectangle** (Прямоугольник), **Rounded Rectangle** (Прямоугольник с округленными углами), **Ellipse** (Эллипс), **Polygon** (Многоугольник). К созданным объектам можно применять различные операции: вращение, изменение порядка, выравнивание, группировка и др. Кнопки этих операций находятся на панели инструментов.

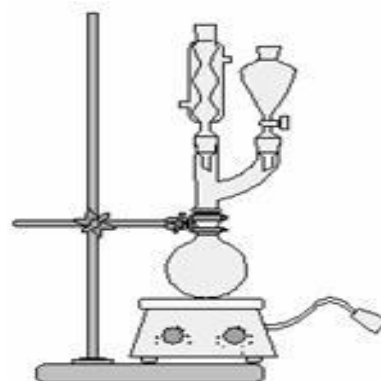
Как и во многих других векторных графических редакторах, для построения графических объектов используются кривые Безье.

Для форматирования созданных объектов можно использовать меню **Tools-Update Object Style Panel** или двойной щелчок мышки по любому графическому объекту. При этом открывается Object Panel (панель форматирования объекта), позволяющая настроить различные параметры линий (**Pen**) и заливки (**Fill**), тени (**Shadow**) автофигур.



При работе с этими панелями нужно установить требуемые параметры, затем нажать кнопку **Apply** (Применить). Панели форматирования можно передвигать в удобное место и сворачивать.

При создании графических изображений удобно использовать шаблоны рисунков, доступ к которым можно получить, используя кнопку **Open Template Window** (Открыть окно шаблонов) или соответствующую команду меню **Templates**. Работа с шаблонами рисунков аналогична работе с шаблонами химических структур.



1.4. Программа ACD/3D Viewer

Компьютерные модели молекул

Программа 3D Viewer, позволяющая увидеть (даже в движении) различные модели молекул, формулы которых нарисованы в ChemSketch, скопировать изображения этих моделей и сами модели в различные документы, в презентации.

ACD/3D Viewer – программа быстрого и точного моделирования и визуализации структур. Она полностью связана с программой ACD/ChemSketch, что позволяет рисовать структуры 2D и быстро получать из них прекрасные цветные 3D изображения. С программой ACD/3D Viewer можно:

- управлять 3D моделями: перемещать, вращать 2D и 3D изображения, изменять размер, стили и цвета;
- отобразить 3D структуру в виде стержней, стержней и шаров, сфер или дисков;
- в 3D структуры твердых веществ добавлять изображение границ окутывающих сил Ван-дер-Ваальса в виде мелких точек;
- измерять и изменять длины связей, углы между плоскостями связей и торсионных углов;
- оптимизировать структуры, используя силовые поля типа 3D CHARMM;
- щелчком кнопки в окне программы ACD/ChemSketch переключаться от 3D дисплея к 2D;
- пользоваться конфигурацией автономного вращения 3D молекулы, с/или без изменения стиля показа структуры;
- рассматривать 3D структуру в перспективе;
- отображать кратные связи в режиме показа вращения проволочных структур (Wireframe);
- экспортировать 3D модели в другие программы геометрических оптимизаций и использовать их как хорошие стартовые конфигурации.

Для запуска программы **3D Viewer** из ChemSketch можно использовать команду меню **ACD/Labs - 3D Viewer**. После запуска программы в нижней части окна появляются кнопки **Copy to 3D** и **View 3D**

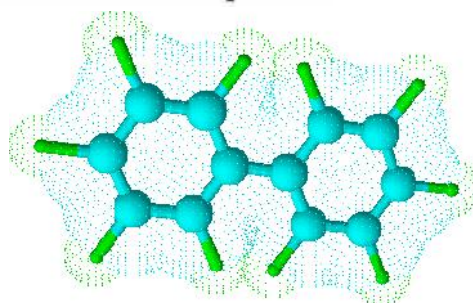


. Для передачи структуры в просмотрщик надо ее выделить и нажать кнопку **Copy to 3D**. При этом модель выделенной молекулы открывается в отдельном окне. Для работы с созданной моделью доступны большое число операций, осуществить которые можно с помощью меню или панелей инструментов. В любой момент модель может

быть возвращена в окно ChemSketch (кнопка **Copy to ChemSketch**), где возможно ее дальнейшее редактирование.



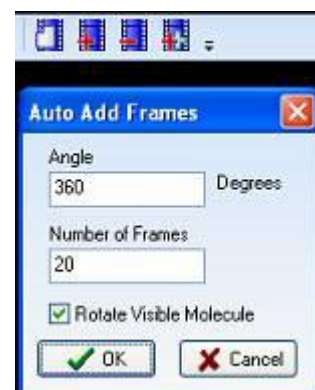
На панели инструментов **3D Viewer** есть группы кнопок, позволяющие менять размеры и вращать модель, устанавливать определенный тип модели, проводить измерение длин связей и углов.



Специальными кнопками и командами меню можно настроить цвет фона, атомов, размеры. Можно запустить автоматическое вращение модели.

Компьютерные модели могут быть сохранены в специальном формате (*.s3D). Они могут быть также распечатаны и сохранены в виде графических файлов. В том числе возможно создание и анимированных файлов *.gif.

Анимированные рисунки – это файлы, содержащие несколько изображений, кадров (**Frame**), последовательность которых показывает перемещение объекта. Для создания таких рисунков есть несколько команд, наиболее простой из которых является автоматическое создание (**Auto Add Frames**). Щелчок по этой кнопке открывает окно, где можно задать угол поворота модели и число кадров, на которое будет разбито это движение.



После нажатия кнопки **OK** происходит запись анимации в память компьютера. Для ее сохранения в формате gif используется команда меню **File-Save As**, с выбором формата файла **Animated GIF images**. Надо учитывать, что чем больше размеры модели и чем больше кадров задано при создании анимации, тем больше будет размер файла.

Алгоритм 3D оптимизации

Алгоритм 3D оптимизации быстро преобразует плоскую (2D) структуру, созданную в программе ACD/ChemSketch, в реалистическую 3D структуру. Это основано на изменении молекулярной механики, которая принимает во внимание длину связей, величину угла, внутреннее вращение и не создающие связей вандерваальсовы взаимодействия. Модификации включают незначительные упрощения потенциальных функций и

осуществление схемы минимизации дополнительными эвристическими алгоритмами для «плохо ведущих себя» стартовых конфигураций.

Алгоритм 3D оптимизации - патентная версия молекулярного механизма с силовыми полями, первоначально основанными на CHARMM параметрах. Модификации включают некоторые упрощения и были предназначены для увеличения стабильности и скорости вычисления. Следует учитывать, что 3D оптимизация не является полномасштабным молекулярным двигателем. Она, скорее, стремится воссоздать как можно ближе к действительности соответствующие 2D конфигурации (возможно, очень «неблагоразумные»), чем точно оптимизировать 3D структуры.

ACD/3D Viewer может оптимизировать только структуры, содержащие атомы от водорода до ксенона со стандартной валентностью и в связанных состояниях. Не принимаются во внимание водородные связи. В структуре молекулы, подвергающейся оптимизированию, не может быть более 250 атомов, включая и число невидимых водородных атомов.

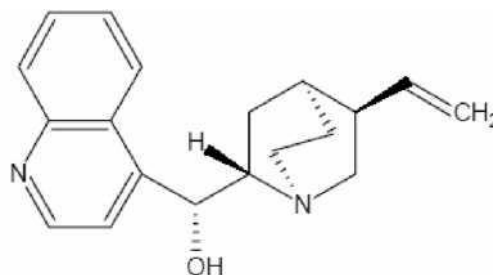
Вставка молекулы и ее 3D оптимизирование

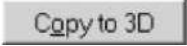
Запустите ACD/3D Viewer. Щелкните ChemSketch  в полосе переключения окон. Это действие активизирует окно ChemSketch. Щелкните кнопку **Dictionary** (Словарь)  в верхней правой части окна.

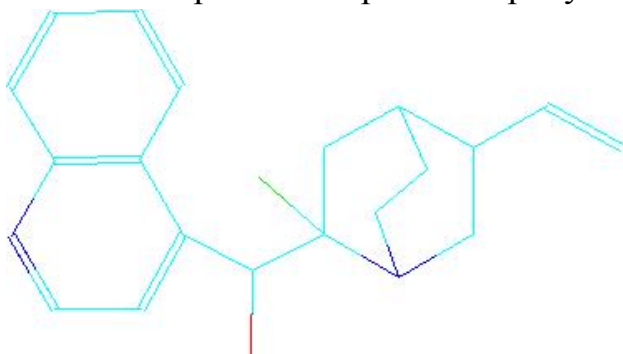
В свободно распространяемую версию ChemSketch модуль словаря не включен. Этот модуль доступен только для коммерческой версии, поэтому если используется свободно распространяемая версия ChemSketch, при рисовании структур пользуйтесь инструментальными средствами интерфейса ChemSketch. Для выяснения деталей относительно рисования структур обратитесь к руководству *ACD/ChemSketchTutorial*.

В блоке **QuickSearch** (Быстрый поиск) в появляющемся диалоговом окне ACD/Dictionary, напечатайте “*cinchonidine*” (цинхонидин) – антималярийный агент, который извлекается из коры различных разновидностей цинхоны). После выбора в списке необходимого названия и отображения соответствующей структуры щелкните **OK**.

Обратите внимание, что тень выбранной структуры висит рядом с курсором. Щелкните на рабочем пространстве, чтобы поместить структуру в окно ChemSketch:



Щелкните **Copy to 3D**  в полосе переключения окон, чтобы переместить молекулу в окно ACD/3D Viewer. В 3D окне увидите появившийся простой стержневой рисунок.



Чтобы создать 3D модель из 2D химической структуры, щелкните **3D Optimization** (3D Оптимизация) . Обратите внимание, что при этом добавляются водородные атомы.

Инструменты управления графическими возможностями 3D Viewer

Щелкните **3D Rotate** (3D вращение)  и переместитесь по рабочему пространству, чтобы вращать структуру в трехмерном пространстве.

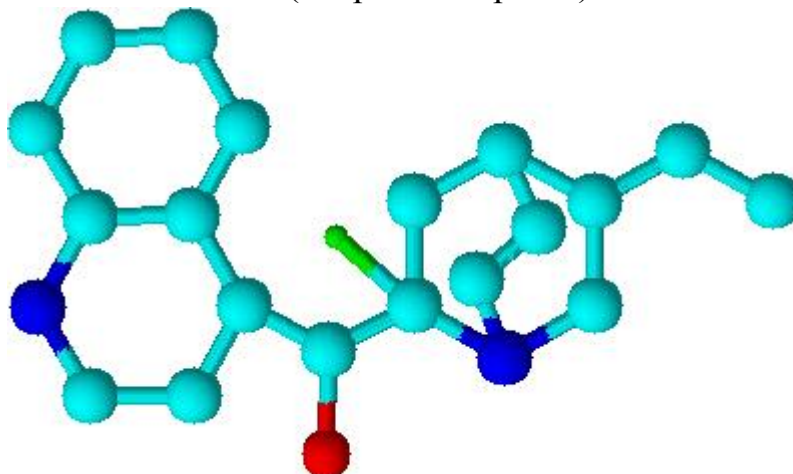
Теперь переключитесь к режиму Z-вращение, щелкая **Rotate**  (Вращение). Если теперь переместиться по рабочему пространству, структура будет вращаться только в двухмерном пространстве.

Щелкните **Move**  (Перемещение), чтобы включить режим **Drag** (перетаскивание), в котором можно перемещать структуру в пространстве вниз-вверх, влево-вправо.

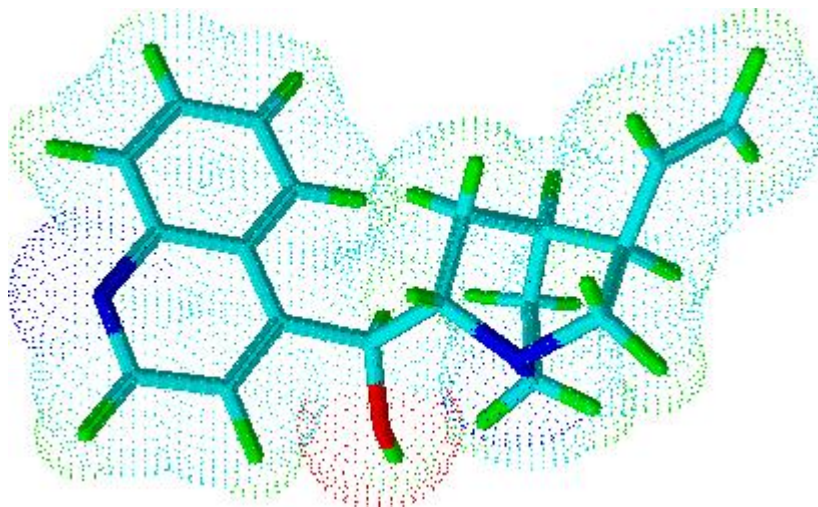
Чтобы изменять размер структуры, щелкните **Resize**  (Изменение размера). Перемещение от центра структуры к границам экрана увеличивает размер структуры, перемещение к центру структуры делает ее меньше.

Щелкните **3D Rotate** , чтобы включить режим 3D вращения.

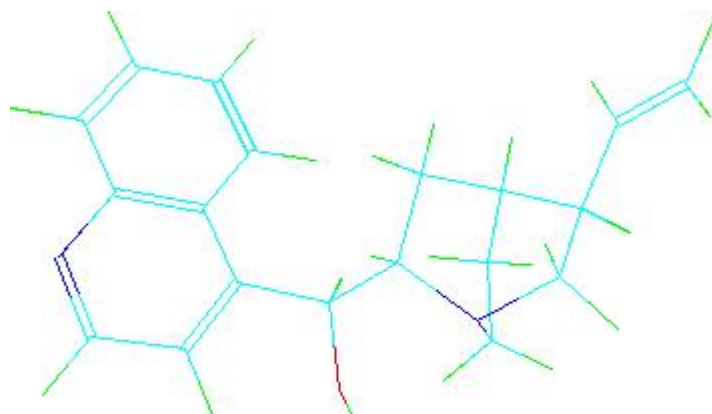
Чтобы представить текущую структуру в виде шаростержневой, щелкните **Balls and Sticks**  (Шары и Стержни).



Чтобы добавить ореол точек к текущему представлению молекулы, щелкните **With Dots** (С точками) . Структура будет выглядеть приблизительно так:



Чтобы отобразить кратные связи, включите режим **Wireframe** (Проволочный), нажимая на инструментальной панели **Top** (Топ), и затем из меню **View** (Вид) выберите **Show Multiple Bonds** (Представление кратных связей):

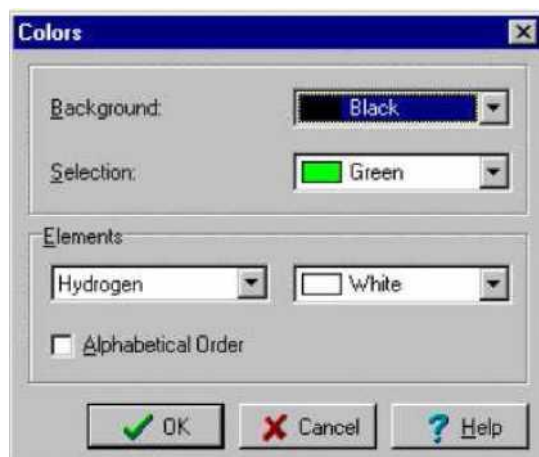


Для того чтобы молекула вращалась автоматически без изменения ее стиля, щелкните **Auto Rotate** . (Автоматическое вращение) (чтобы вращать молекулу автоматически, изменяя ее стиль, щелкните **Auto Rotate and Change Style** ).

Чтобы представить структуру в виде дисков, проволок, точек, сфер, щелкают соответствующие кнопки на инструментальной панели (   или ) , можно также щелкнуть правой кнопкой мыши в рабочем пространстве окна, чтобы переключить тип кнопки режима представления (если активировано любое из инструментальных средств, щелчок правой кнопкой мыши переключает только эти кнопки.).

Для изменения цвета в меню **Options** (Опции) выберите **Colors** (Цвета) или щелкните **Set Colors** (Набор цветов), чтобы отобразить диалоговое окно Colors. Чтобы изменить цвет фона дисплея, выберите требуемый цвет в окошке **Background** (Фон).

Если печать используется часто и много, то лучше всего установите белый цвет фона для экономии чернил.



После установления размеров, наборов атомов, расстояния и углы между которыми имеют определенные значения, устанавливается специальный цвет подсветки. Этот цвет по умолчанию ярко зеленый. Чтобы изменить цвет выбранных атомов, в списке **Selection** (Выбор) выберите желаемый цвет и щелкните **OK**.

Выбор работает отдельно с инструментальными средствами ( или ): **Distance** (Расстояние), **Angle** (Угол) и **Torsion Angle** (Торсионный угол).

Чтобы изменить цвет химического элемента, щелкните на названии элемента в списке и затем выберите желаемый цвет в окошке справа.

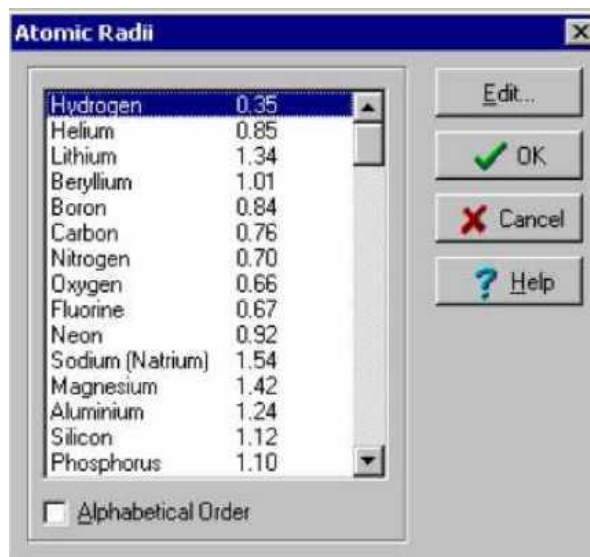
Установив флажок **Alphabetical Order** (Алфавитный порядок), названия элементов в списке устанавливаются в алфавитном порядке. В противном случае они располагаются соответственно своему месту в Периодической таблице элементов.

Щелкните **Mirror**  (Зеркало), чтобы получить зеркальное изображение имеющейся структуры. В этом случае весь порядок стереоцентров в начальной структуре будет инвертирован. Чтобы вернуться назад к начальному виду, щелкните эту кнопку снова.

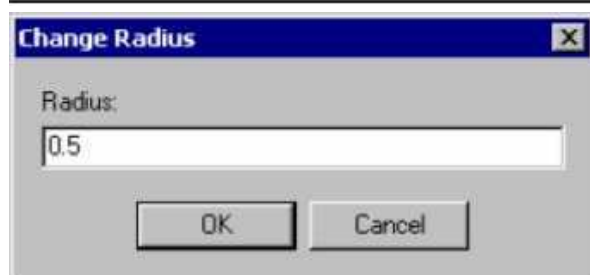
Для того чтобы провести инверсию центра структуры, щелкните

Invert Center  (Инверсия центра) и затем кликните на атоме, чтобы инвертировать его. Этот инструмент инвертирует конфигурацию хирального центра, изменяя пространственную позицию одного или нескольких замещенных выбранных атомов. После этой операции может возникнуть потребность оптимизировать химическую структуру еще раз. Чтобы это осуществить, щелкните **3D Optimization**  (3D оптимизация) на инструментальной панели сверху. Чтобы вернуться назад к начальному виду, щелкните снова **Invert Center**.

Для изменения радиуса атома в меню **Options** (Опции) выберите **Radii** (Радиус), чтобы открыть диалоговое окно **Atomic Radii** (Радиус атома), содержащее параметры по умолчанию радиусов атомов различных элементов. Чтобы увидеть актуальный радиус любого элемента, щелкните на нем в списке. В правом столбце высвечивается соответствующее значение в относительных единицах.



Чтобы изменить радиус атома элемента, дважды щелкните на нем в списке и напечатайте новое значение, например, 0.5 в появляющемся блоке **Change Radius** (Изменение радиуса).



Щелкните **OK**, чтобы подтвердить изменения.

Выполнив изменения в диалоговом окне **Atomic Radii** (Атомный радиус), щелкните **OK**. При следующем запуске ACD/3D Viewer заданные по умолчанию значения будут сброшены к их предыдущим значениям.

Для изменения дисплея (изображения) радиуса атома щелкните **Increase Atoms' Radii by 5 %**  (Увеличение радиуса на 5 %). Каждый дополнительный щелчок этой кнопки увеличивает размер радиуса изображенных атомов на 5 %. Щелкните **Decrease Atoms' Radii by 5 %**  (Уменьшение радиуса на 5 %) размер всех изображенных атомов уменьшится на 5 %. Важно, что эти инструментальные средства не затрагивают фактических размеров радиусов атомов, определенных в диалоговом окне **Atomic Radii**, а только изменяют дисплей.

Можно сохранить параметры настройки изображения, которые были определены в течение текущего сеанса как файл .3DS, загружая их от предварительно сохраненного файла и устанавливая как новое значение по умолчанию.

Для сохранения параметров настройки изображения из меню **Options** (Опции) выберите **Save Settings** (Сохранение изменений), чтобы отобразить соответствующее диалоговое окно.

Установите флажки тех признаков, которые необходимо сохранить. Обратите внимание, что установление флажка **Radii** (Радиус) позволит сохранить параметры настройки, указанные в диалоговом окне **Atomic Radii** (Радиус атома), но не текущие опции дисплея радиуса.



В появляющемся диалоговом окне определите название файла и местоположение (диск и каталог) и щелкните **OK**. Обратите внимание, что файл должен быть сохранен с расширением **.3DS**. Щелкните **Save** (Сохранить), чтобы сохранить файл.

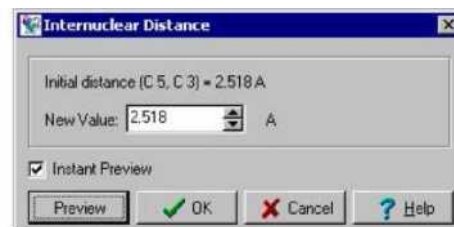
Если предварительно сохранены параметры настройки изображения, то можно их загрузить и для текущего сеанса. В меню **Options** (Опции) выберите **Load Settings** (Загрузка параметров), чтобы открыть диалоговое окно. Найдите **.3DS** файл, который нужно загрузить. Щелкните **Open** (Открыть). Параметры настройки, содержащиеся в этом файле, будут загружены во время текущего рабочего сеанса.

Если нужно использовать определенные параметры настройки, каждый раз, когда работаешь с программой ACD/3D Viewer, то надо установить их, как заданные по умолчанию. Вначале определите требуемые параметры настроек представления. Сохраните их в файле, для этого в меню **Options** (Опции) выберите **Save Settings** (Сохранение изменений). В меню **Options** выберите **Set Default Settings** (Набор предполагаемых изменений). Найдите файл с установкой, которую нужно установить как значение по умолчанию. Щелкните **Open** (Открыть). Теперь всякий раз, когда открываете ACD/3D Viewer, эти параметры настройки будут загружаться, пока не будут установлены другие. Чтобы вернуться к системным параметрам по умолчанию, в меню **Options** выберите **Restore Default Settings** (Восстановление предполагаемых изменений).

Вычисление и изменение структурных параметров

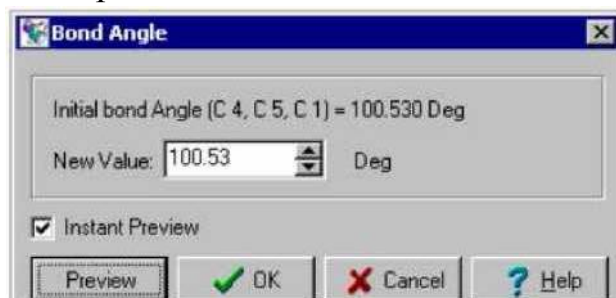
Для вычисления и изменения расстояния между двумя атомами переключателем **Balls and Sticks**  (Шары и стержни) установите режим лучшего представления атомов. Щелкните **Distance**  (Расстояние). Щелкните на любом атоме, чтобы его выбрать, затем переместите указатель поверх другого атома, и щелкните и на нем, чтобы высветить их оба

выбранным цветом. Появляется диалоговое окно **Internuclear Distance** (Межъядерное расстояние). Здесь можно увидеть расстояние между выбранными атомами.



Для того, чтобы изменить расстояние между атомами в диалоговом окне **Internuclear Distance**, печатают желаемое значение в блоке **New Value** (Новое значение). Если флажок **Instant Preview** (Немедленное применение) установлен, изменения немедленно применяются. Если флажок не установлен, после каждого изменения нужно щелкнуть **Preview** (Применить). Начальное расстояние всегда представлено в диалоговом окне, если решили не изменять расстояние, то можно легко вернуться к начальным параметрам настройки. Щелкните **OK**, чтобы применить изменение (любое) и закройте диалоговое окно. Чтобы отменить выбор и запустить новое изменение, нажмите где-нибудь на пустом месте рабочего пространства.

Для вычисления угла между двумя связями щелкните **Angle**  (Угол). Кликните на двух соседних атомах, создающих между собой связь. Переместите указатель на третий атом, который образует связь с последним выбранным атомом. Откроется диалоговое окно **Bond Angle** (Угол связи):

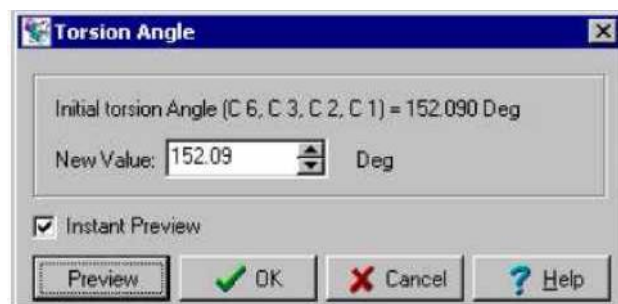


В строке состояния появляется рассчитанное угловое значение.

Для изменения значения угла, в диалоговом окне **Bond Angle** (Угол связи), печатают желаемое значение в блоке **New Value** (Новое значение). Если флажок **Instant Preview** (Немедленное применение) установлен, изменения немедленно применяются. Начальный угол всегда представлен в диалоговом окне, если вы решили не изменять угол, то можно легко вернуться к начальным параметрам настройки. Щелкните **OK**, чтобы применить изменение и закройте диалоговое окно. Чтобы отменить выбор и запустить новое изменение, нажмите где-нибудь на пустом месте рабочего пространства. Для прекращения использования этого инструмента нажмите на его кнопку и снимите выделение.

Для вычисления торсионного угла щелкните **Torsion Angle**  (Торсионный угол). Кликните на двух атомах, образующих общую связь. Соответствующая связь становится выбранной.

Точно таким же образом щелкните еще на двух атомах, смежных с ранее выбранной связью. В результате будут выбраны три смежных связи, создающие торсионный угол. Появляется диалоговое окно **Torsion Angle**.



Не выбрав третью связь, можно просмотреть значения всех возможных углов вращения, граничащих с последним выбранным атомом, перемещая указатель по смежным атомам. Попробуйте изменить значение в блоке **New Value** (Новое значение). Если флажок **Instant Preview** (Немедленное применение) установлен, изменения немедленно применяются. Начальный торсионный угол всегда представлен в диалоговом окне, если вы решили не изменять угол, то можно легко вернуться к начальным параметрам настройки. Щелкните **OK**, чтобы применить изменение и закройте диалоговое окно.

Чтобы отменить выбор и запустить новое изменение, нажмите где-нибудь на пустом месте рабочего пространства. Для прекращения использования этого инструмента нажмите на его кнопке и снимите выделение.

Использование объектов ChemSketch

Страницы документов ChemSketch могут быть сохранены и в нужный момент распечатаны (меню **File – Print**). Эти документы могут быть экспортированы, преобразованы в файлы других форматов (меню **File – Export**), например, в файлы рисунков *.gif, в том числе анимированных.

Отдельные объекты со страниц ChemSketch могут быть обычными приемами скопированы в буферы вставлены в документы других программ, в презентации или в документы MS Word. Двойной щелчок на таких объектах в Word'овском документе запустит ChemSketch и откроет структуру для редактирования (разумеется, если ChemSketch установлен на данном компьютере). Аналогичные возможности существуют и в программе 3D Viewer.

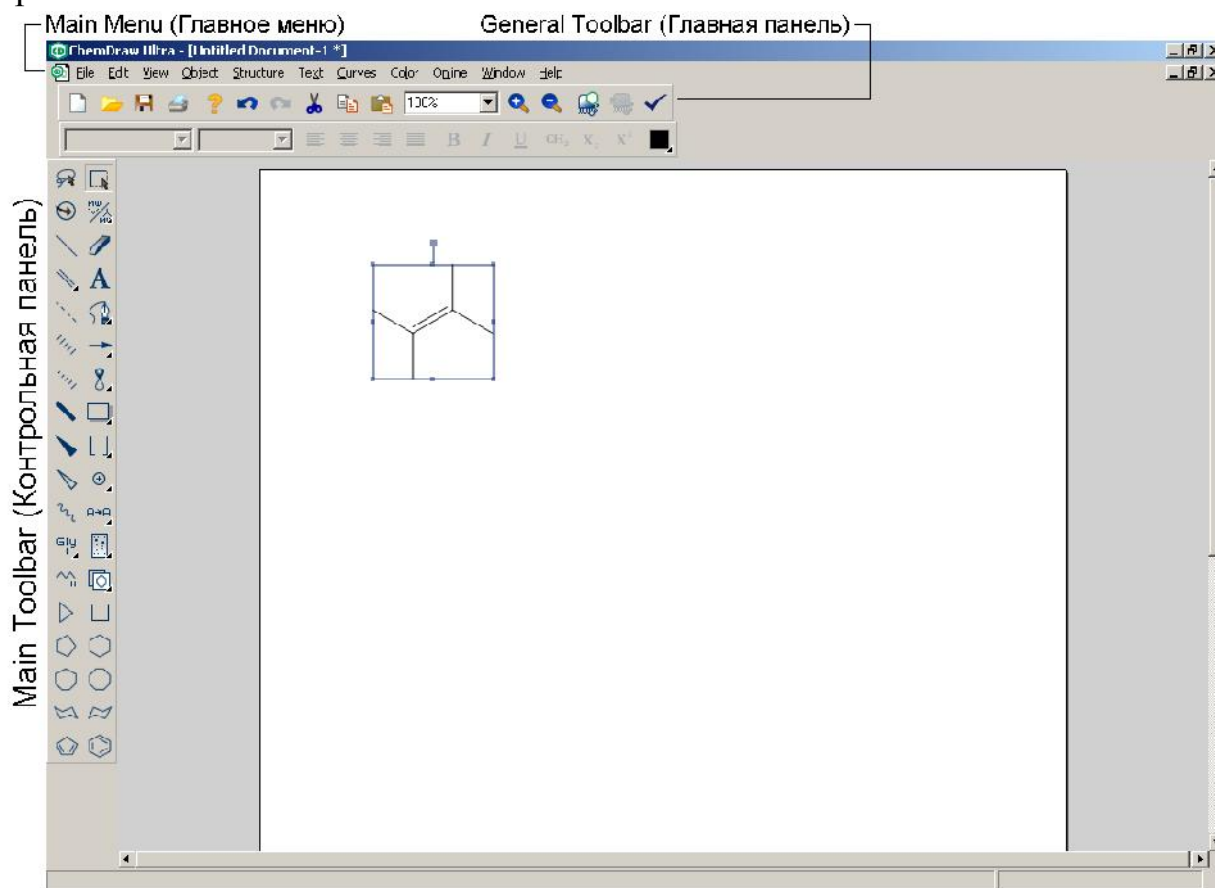
Редактор ChemSketch может не только сохранять, но и открывать для редактирования файлы других химических редакторов. Конечно, если страница сохранена как рисунок, дальнейшее ее редактирование будет возможно только как графического объекта.

2. РЕДАКТИРОВАНИЕ В ПРОГРАММНОМ ПАКЕТЕ CHEMOFFICE

2.1. Создание структурных формул в программе ChemDraw

Программа ChemDraw, являющаяся одним из компонентов интегрированного пакета программных средств ChemOffice, предназначена для двумерного изображения молекулярных структур и относится к так называемым двумерным химическим редакторам. Она позволяет отображать на плоскости молекулярные структуры любой сложности, записывать уравнения реакции, именовать молекулы и преобразовывать их в дальнейшем в трехмерные модели Chem3D. В настоящее время фирма CambridgeSoft, выпускающая данное программное обеспечение, разделила выпускаемые версии на несколько градаций, предназначенных для разных групп пользователей в зависимости от выполняемых задач. Например, химики пользуются **ChemDraw**, а биологи и биохимики – **BioDraw**; в зависимости от полноты функций могут быть версии **Std**, **Pro**, **Ultra**. Версия **Ultra** включает в себя не только наибольшее количество функций, но и может быть использована как химиками, так и биохимиками.

Все представленные на экране элементы пользовательского интерфейса программы ChemDraw Ultra 11.0 разделяют следующим образом:



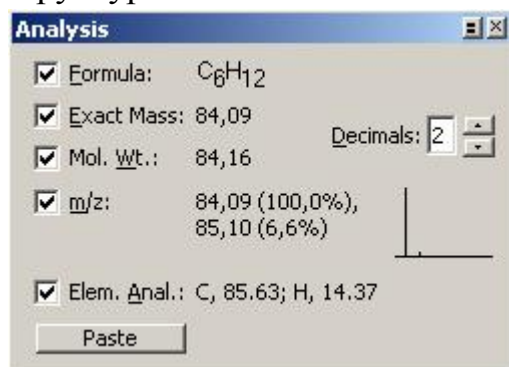
Важнейшие элементы главной панели

Изменение масштаба окна отображения молекулярных структур

осуществляется с помощью кнопок  (**Zoom**). Для того чтобы переместить выделенные объекты на передний/задний план, используйте

кнопки  **Bring to front/Send to back**.

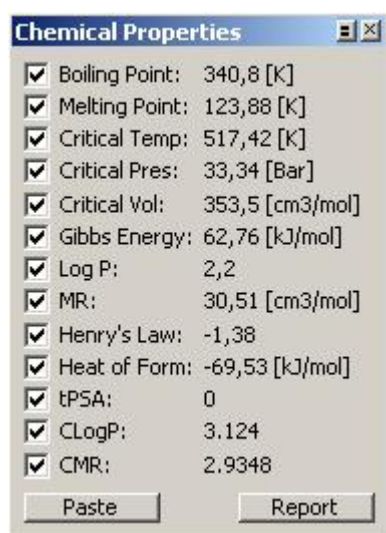
Кнопка  **Checks the selected structure(s)** проверяет выделенную молекулярную структуру на наличие ошибок, а кнопка  **Clean Up Structure** проверяет соответствие молекулы обычным длинам связей и углам. Если соответствие отсутствует (особенно, когда молекула рисовалась вручную), то делаются необходимые исправления в ее структуре.



Нарисовав конкретную молекулу и выделив ее с помощью одной из трех кнопок  контрольной панели, можно узнать подробные ее характеристики.

Для этого нужно выбрать пункт главного меню **View – Show Analysis Window**, после этого появится панель с данными структуры выделенной молекулы. При нажатии на панели **Analysis** кнопки **Paste** данные по структуре появятся на экране под молекулой. Дополнительную информацию можно получить при выборе пункта **View – Show Chemical Properties Window**.

Кнопка **Structure** главного меню позволяет получить доступ ко многим инструментам для оценки свойства структуры целиком или ее отдельных элементов.



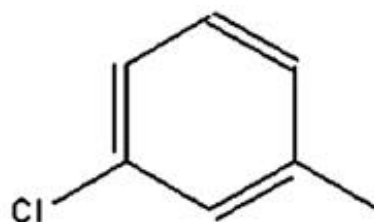
Кнопка **Atomic properties** вызывает одноименное окно со свойствами атомов. Аналогичную функцию, только для связей, выполняет кнопка **Bond properties**.

Кнопки **Style Bar** (панели стилей) предназначены для настройки шрифта, размера шрифта, стиля букв и нижней и верхней индексации аналогично панели стандартного Word.



Еще одна важная функция, о которой следует упомянуть, это возможность именовать молекулярные структуры по внешнему виду. Вы рисуете или выбираете молекулу, затем выделяете ее и вызываете пункт главного меню **Structure** (Структура), а в ней **Convert Structure to Name** (Преобразовать структуру в название).

После небольшой паузы программа выдаст вам название молекулы, например, 1-хлор-3-метилбензол. Щелкнув мышкой в любом пустом месте рабочего окна, получим четкое изображение. Иногда назвать сложные химические структуры затруднительно — здесь придет на помощь ChemDraw.

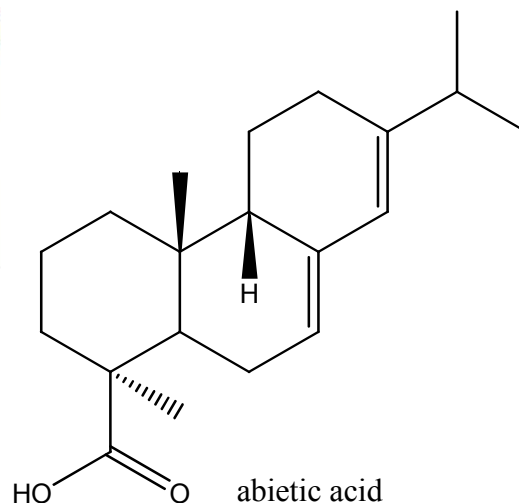


1-chloro-3-methylbenzene

Обратную операцию — преобразование имени в структуру (**Convert Name to Structure**) — можно вызвать из того же пункта главного меню **Structure** (Структура). Например, если название вещества по-английски вписать в появившееся окно, затем нажать **OK**, то программа нарисует эту молекулу следующим образом:



В дальнейшем эти и другие молекулярные структуры можно конвертировать в Chem3D простым копированием их из ChemDraw.



Важнейшие элементы контрольной панели

С помощью контрольной панели или панели инструментов (количество, вид и функции кнопок в различных версиях могут не совпадать) осуществляется процесс рисования большинства молекулярных структур.



Кнопки **Lasso** и **Marquee** осуществляют выделение нарисованных молекул или их фрагментов с помощью лассо или прямоугольников.



Кнопка показывает структуру в пространстве.



Кнопка позволяет фрагментировать молекулу, что может быть полезным при использовании масс-спектрометрии.



Кнопка **Eraser** удаляет атомы/связи.

Кнопки **Bonds** предназначены для добавления связей (названия приведены не по химическому типу, а по виду отображения):



простая

кратные

пунктирная

штриховая

штриховой стереоклин

полужирная

полужирный стереоклин

полый стереоклин

волнистая.



Кнопка **Text** предназначена для ввода текста. Параметры шрифта и индексация настраиваются с помощью главной панели.



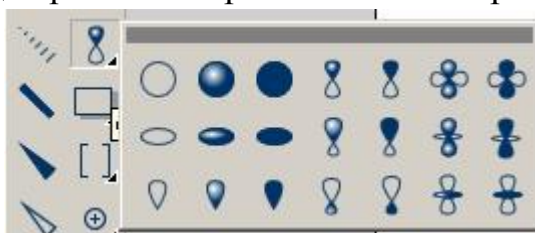
Кнопка **Pen** включает режим рисования векторной графики: сглаженной ломаной линии.



Добавление всевозможных стрелок производится кнопкой **Arrow**.

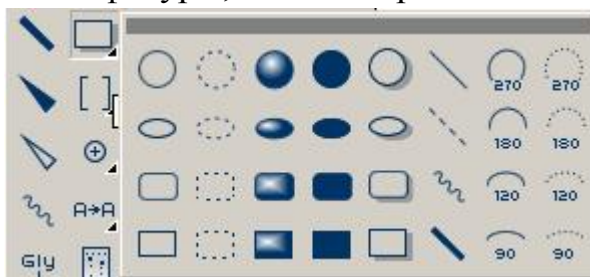


Кнопка **Orbital** для рисования различных электронных орбиталей.





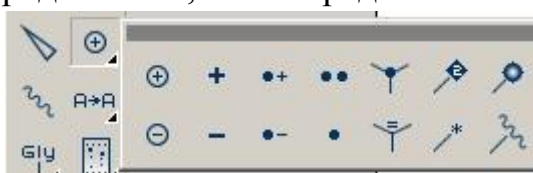
Кнопка **Drawing Elements** добавляет различные элементы рисования: скобки, плоские фигуры, линии и др.



Кнопка **Brackettool** позволяет изображать различные скобки.



Кнопки (**Chemical Symbols**) позволяют нарисовать особые химические символы (заряды ионов, значки радикалов и пр.).



Кнопка **Query tools** может быть использована при создании различных запросов.



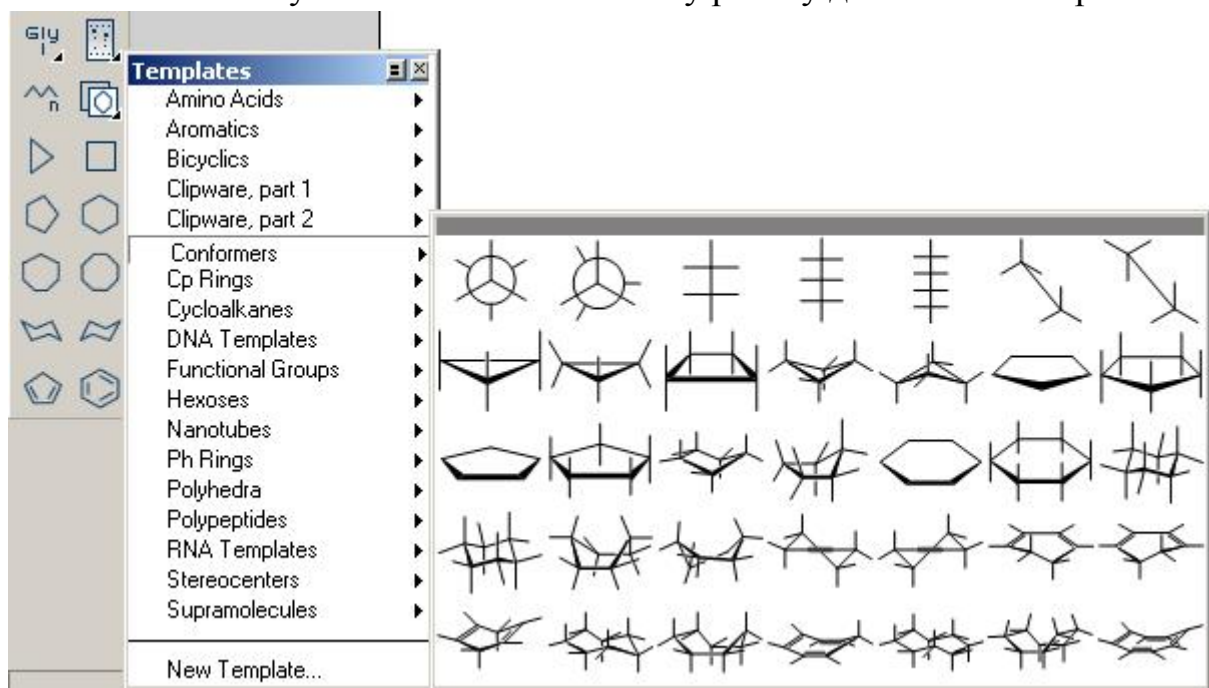
Кнопка (**Atom-to-Atom mapping**) отображает соответствие реакционных центров молекул. Поддерживаются только одностадийные реакции.



Кнопка служит для моделирования пластин тонкослойной хроматографии.



Кнопка **Templates** вызывает контекстное меню заготовок: аминокислот, ароматических циклов, бициклов, конформеров и т.д. Все они могут быть вставлены в вашу работу для экономии времени.





Кнопка (**Acyclic Chain**) создает цепь с указанным числом звеньев.



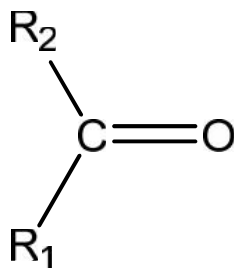
Серия кнопок от   до   (**Rings**) позволяет быстро добавить различные кольца циклоалканов и ароматические кольца.

Схемы химических реакций в ChemDraw

Запись схемы химической реакции

В качестве примера выберем упрощенный вариант механизма реакции Гриньяра (с магнийорганическими веществами).

1. Прежде всего, нарисуете молекулу карбонильного соединения:



Для этого нажмите кнопку **Solid Bond** и с ее помощью добавьте на лист простую связь. Подведите курсор к концу связи и добавьте еще одну связь – она присоединит второй радикал R_2 . Третья связь будет соединять углерод и кислород. Проведите ее из центрального углеродного атома.

Чтобы сделать ее двойной, необходимо повторить операцию добавления связи повторно или вызвать контекстное меню связи (правым щелчком мыши) и выбрать пункт **Double Plane**. Теперь проставьте названия атомов, двойным щелчком на каждом атоме задайте его тип.

2. Выделите созданный рисунок кнопкой **Marquee** и нажмите кнопку **Clean Up Structure** для приведения структуры к нормальным длинам связей и углам. Если молекула слегка повернулась на рабочем поле, верните ее к исходному виду, выделив ее, а затем в главном меню пункт **Object – Rotate** и укажите угол « -60° », далее нажмите внутри контекстного меню кнопку **Rotate**. Молекула карбонильного соединения готова.

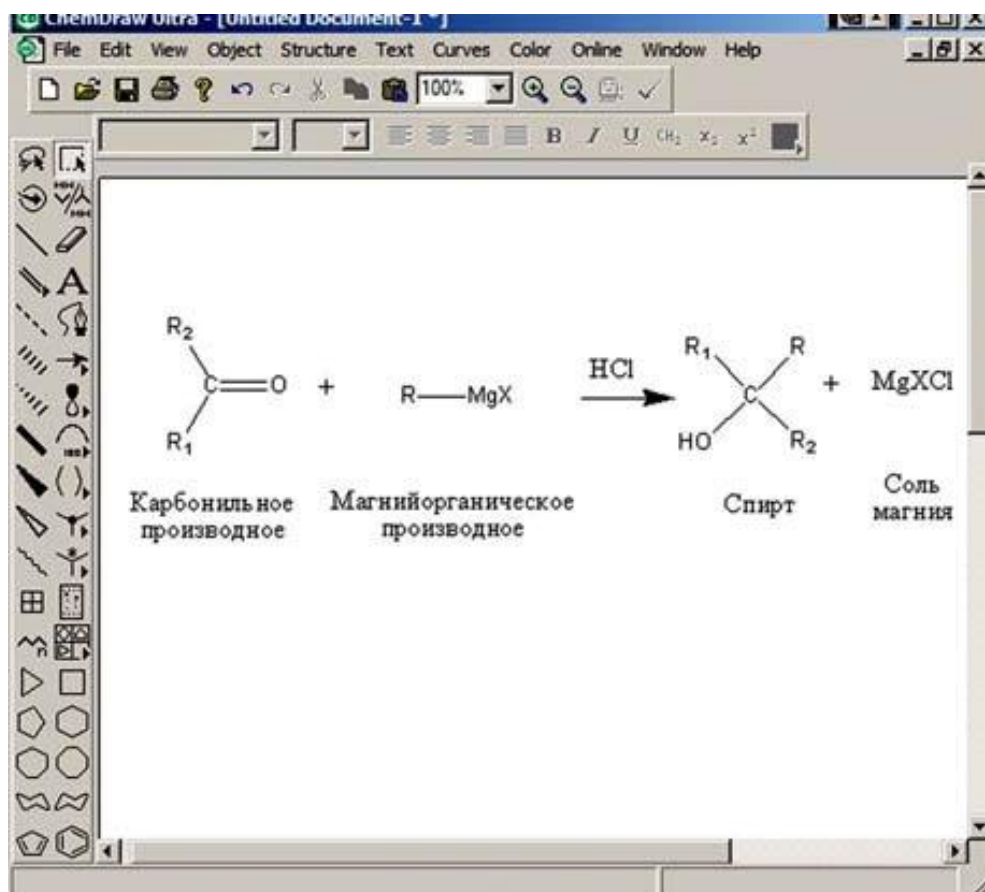
3. Теперь добавьте аналогичным образом второй реагент: магнийорганическое производное $R - MgX$.

4. И, наконец, нарисуйте продукты реакции: спирт и соль магния. Не забывайте каждый раз после создания молекулярной структуры проводить нормализацию углов и связей кнопкой **Clean Up Structure**.

5. Для удобства увеличьте масштаб листа кнопкой  **Magnify**.

6. Теперь добавьте стрелку и знак «плюс». Это осуществляется с по-

мощью кнопок  **Arrows** и  **Text**. Также не забудьте подписать названия вещества и условия реакции, если это необходимо, добавляя текстовые поля кнопкой **Text**. В итоге получается требуемое уравнение реакции (синтез Гриньяра).

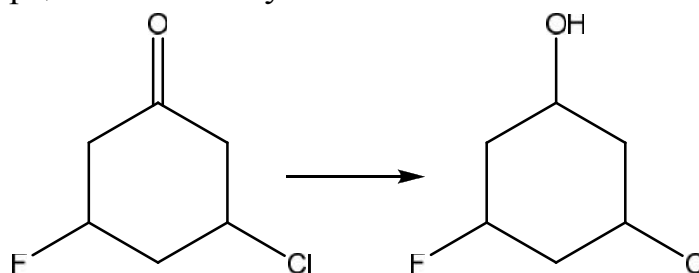


Чтобы пронумеровать атомы выполните следующие действия: **Object – Object Settings... – Drawing – Show Atom Numbers.**

Запись схемы реакции с указанием реакционных центров

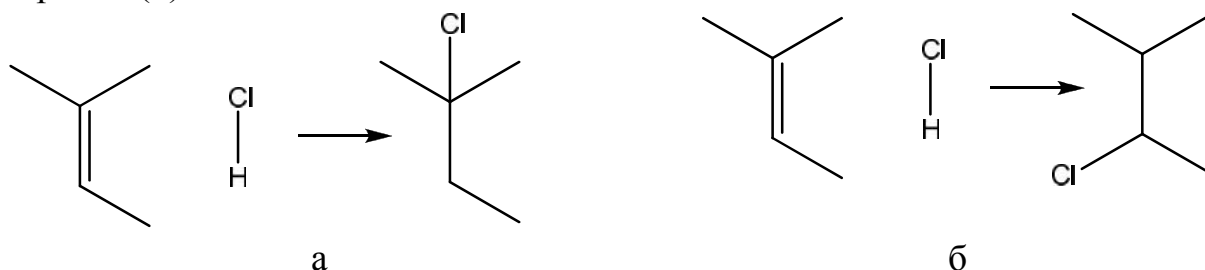
Указание реакционных центров позволяет прояснить в необходимых случаях механизм химической реакции. Кроме того, при хранении схем химических реакций в базе данных с использованием программы ChemFinder в ней может быть произведен поиск реакции по типу реакционного центра.

Наиболее важная часть реакции – это часть, в которой происходят изменения от реагентов к продуктам реакции. Эта часть, которая может включать в себя ряд атомов и связей, называется реакционным центром. Например, в молекуле 3-хлор-5-фторциклогексанона при восстановлении карбонильной группы только двойная связь и два образующих ее атома являются частью реакционного центра. Остальные фрагменты при переходе к продукту 3-хлор-5-фторциклогексанолу остаются без изменений.



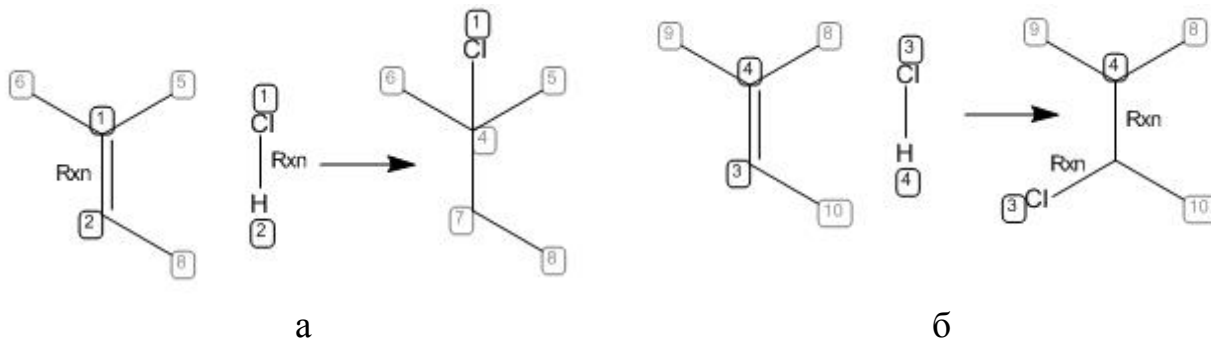
В программе ChemDraw существуют специальные средства для указания реакционных центров в структурной формуле молекулы.

Рассмотрим реакцию гидрохлорирования 2-метилбутена-2, которая может протекать по двум направлениям: по правилу Марковникова (а) и против (б).



Для того чтобы указать на каждой из схем атомы углерода, по которым идет реакция, удобно создать карту реакции. В карте реакции можно указать реакционные центры: номера атомов, которые принимают участие в химическом превращении. Создадим карты первой и второй реакций. Нарисуйте схемы обеих реакций. Для указания реакционных центров в первой реакции выделите всю реакцию (а) и в главном меню **Structure** нажмите кнопку **Map Reaction Atoms**, при этом автоматически около атомов и связей будут созданы символы реакционных центров.

Альтернативный вариант построения карты реакции (б): воспользуйтесь панелью Query Tool (**View – Other toolbars – Query Tool**), Выделите требуемую реакцию, нажмите кнопку  **Map Reaction Atoms**. Затем проведите стрелку от атома водорода к третьему атому углерода:



Во второй реакции стрелку необходимо провести от атома хлора к третьему атому углерода и от атома водорода – ко второму атому углерода.

Символ **Rxn** обозначает реакционный центр. Лишние реакционные центры удалите. Для этого выберите соответствующую связь, вызовите правой кнопкой мыши ее контекстное меню и выберите пункт **Hide Indicator**. Оставьте символы **Rxn** только у двойной связи и у связи H-Cl.

Таким образом, создана карта реакции. Теперь, если при включенной кнопке  указать мышью на один из атомов реакционного центра первой молекулы, на второй молекуле автоматически выделится другой атом, уча-

ствующий в реакции. В дальнейшем помеченная таким образом реакция может быть сохранена в базе данных программы ChemFinder, и ней может быть осуществлен поиск по типу реакционного центра.

2.2. Визуализация молекулярных структур с использованием программы Chem3D пакета ChemOffice

В отличие от двумерных редакторов химических формул, программа Chem3D позволяет осуществлять полное трехмерное моделирование и визуализацию химических соединений.

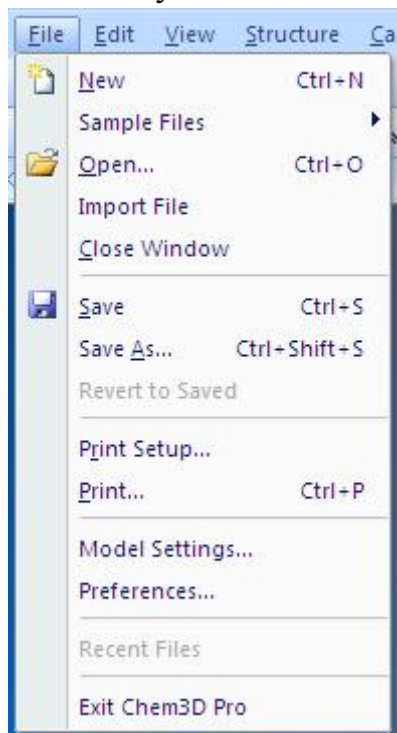
Основным приложением пакета ChemOffice является программа Chem3D. В данном разделе будет рассмотрено только создание и редактирование трехмерных моделей химических соединений в пакете Chem3D.

Пользовательский интерфейс программы Chem3D Pro

После успешной установки Chem3D перед вами откроется стартовый экран программы, расположение главного меню и рабочих панелей аналогично программе ChemDraw. В центре экрана располагается окно, где будет отображаться процесс создания/редактирования трехмерных моделей молекул.

При построении модели одновременно работают два окна, соответствующих 2D (ChemDraw) и 3D (собственно Chem3D) моделям.

Как и в любом стандартном приложении Windows, Chem3D имеет главное меню, расположенное вверху экрана. Посредством его осуществляется доступ к основным функциям пакета.



Пункт меню **File** (Файл) содержит стандартный набор возможностей для открытия, сохранения и печати файлов

Пункт **New** (Новая модель) открывает новое окно пользователя. Отметим, что Chem3D Ultra работает в многооконном режиме.

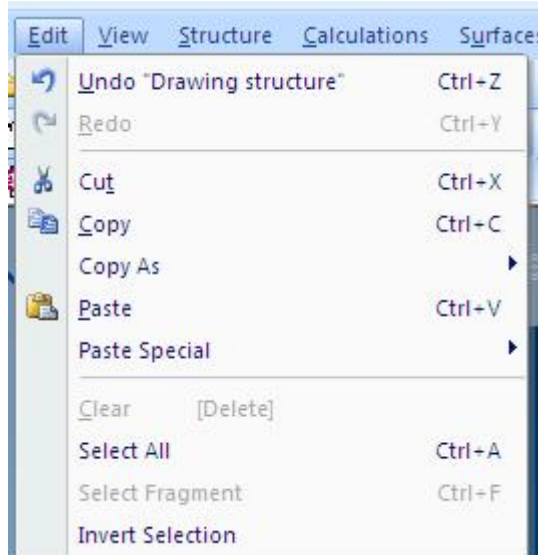
Пункт **Sample Files** (Заготовки) предлагает открыть новое окно с уже заданными настройками (например, цвет фона или способ отображения молекул) или с заготовками моделей молекул (например, фуллерен).

Пункты **Open/Close Window/Save/Save As** (Открыть / Закрыть окно / Сохранить / Сохранить как) представляют собой стандартные функции открытия, закрытия и сохранения файлов.

Пункт **Preferences** позволяет использовать разные начальные установки, в том числе установки, принятые по умолчанию, сохранение рисунков в предпочитаемом формате и т.п.

Пункты **Print/Print Setup** (Печать/Настройка) открывают стандартное диалоговое окно для настройки и последующей распечатки файла.

Пункт **Revert to Saved** (Вернуться к сохраненному) убирает все изменения после последнего сохранения.



Пункт меню **Edit** (Правка) также предоставляет обычный набор функций копирования, вставки, отмены последнего действия и выбора.

Пункт **Undo/Redo** (Отменить/Вернуть) отменяет или, наоборот, возвращает изменения последнего действия.

Пункт **Cut** (Вырезать) вырезает выбранный элемент молекулы/текст и копирует его в буфер обмена.

Пункт **Copy** (Копировать) копирует выбранный элемент молекулы/текст в буфер обмена.

Пункт **Paste** (Вставить) вставляет выбранный элемент молекулы/текст из буфера обмена.

Пункт **Clear** (Очистить) удаляет выбранный элемент/текст.

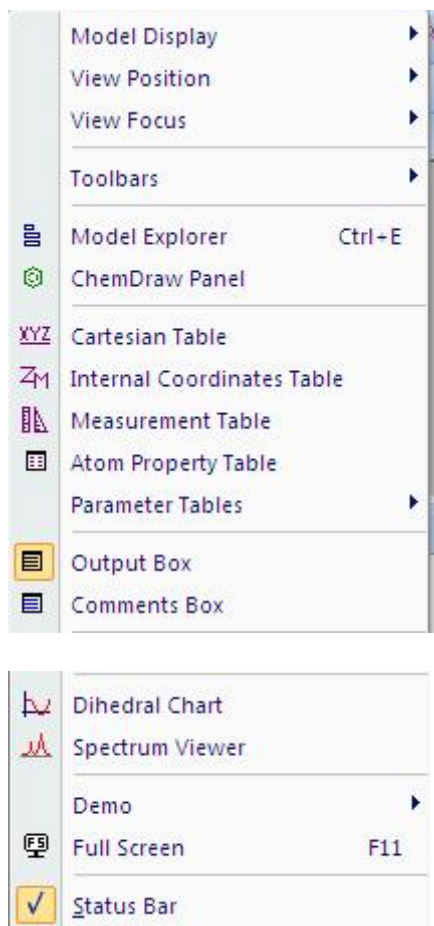
Пункт **Copy As** (Копировать как) позволяет копировать выделенное как структуру ChemDraw или растр (**Bitmap**).

Пункт **Select All** (Выбрать все) выбирает все элементы, **Select Fragment** выбирает все атомы данного фрагмента.

Пункт **Clear (Delete)** (Очистить) позволяет очистить кадры/молекулярные поверхности/расчеты.

Пункт меню **View** (Вид) предоставляет широкий ассортимент настроек вида молекул/связей/панелей и т.д.

Пункт **Model Display** (Вид молекулы) позволяет управлять параметрами модели молекулы (показывать и скрывать атомы водорода, неподелённые электронные пары, водородные и делокализованные связи), расставлять различные метки (символы атомов и их групп, нумерацию), получить перспективные изображения, а также стереоизображения, аналогичные кинофильмам в 3D формате. Пункты **View Position** (Позиция просмотра) и **View Focus** дают возможность изменить масштаб, угол обзора и другие параметры просмотра.



Пункт **Toolbars** позволяет подключать различные панели инструментов (стандартную панель, панель построения, панель просмотра модели, панель поверхности, демо-панель, панель расчетов).

Пункты **Model Explorer** и **ChemDraw Panel** позволяют подключить дополнительные окна, с помощью которых можно более детально проследить отдельные части молекулы, а также строить молекулы в 2D формате.

Следующий раздел включает различные таблицы (**Tables**), описывающие различные параметры молекулы в целом, отдельных связей и атомов.

Данные из этих таблиц используются в расчетах. Например, таблица MM2 Atom Type Parameters содержит поля с параметрами атомов, используемыми при расчете энергии молекулы методом молекулярной механики.

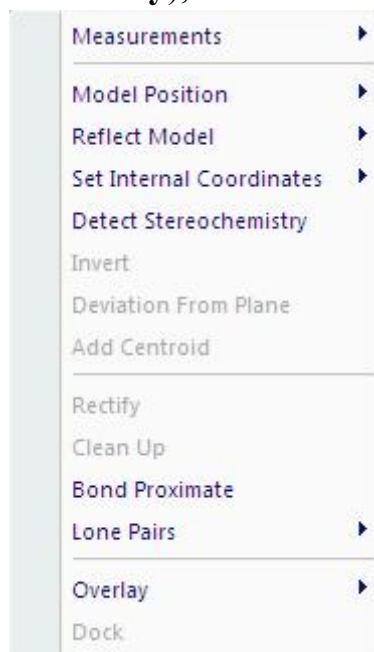
Раздел **Output Box** и **Comments Box** позволяет вывести в нижнюю часть окна результаты расчетов и комментарии пользователя. Пункты **Dihedral Chart** и **Spectrum Viewer** выводят специальную информацию, относящуюся к рассматриваемой молекуле. Пункт **Demo** позволяет показать 3D модель в движении и управлять различными параметрами анимации, пункт **Full Screen** разворачивает изображение во весь экран. Пункт **Status Bar** включает отображение строки состояния.

Пункт главного меню **Structure** (Структура) предлагает различные возможности измерения и изменения структуры модели и объединяет функции, с помощью которых можно визуализировать различные расчетные характеристики молекулярной модели. Подробнее соответствующие расчетные методы компьютерной химии будут рассмотрены в последующих разделах.

Пункт **Measurements** показывает наглядно все возможные углы и расстояния в молекуле, дает их числовые значения.

Следующий раздел позволяет перемещать модель в различных осях (**Model Position**), получить ее зеркальное отображение относительно различных плоскостей (**Reflect model**), взять за основу внутренних координат отдельный атом, связь или двугранный угол (**Set Internal Coordinates**), оп-

редилить, при наличии, пространственную R,S-изомерию (**Detect Stereochemistry**), изменить симметрию выбранного хирального центра (**Invert**),



определить среднее расстояние от плоскости по методу наименьших квадратов для выбранных атомов цикла (**Deviation From Plane**), создать атом-пустышку в центре выделенной молекулы, что удобно при моделировании координационных соединений (**Add Centroid**). Функция **Rectify** (Исправить) проверяет наличие в молекуле связей, согласно химическим правилам. Например, если четырехвалентный углерод содержит только две связи, будут добавлены два атома водорода. По умолчанию это делается автоматически. Функция **Clean Up** (Очистить) проверяет соответствие в модели молекулы длин связей и валентных углов принятым в химии стандартным значениям. Если

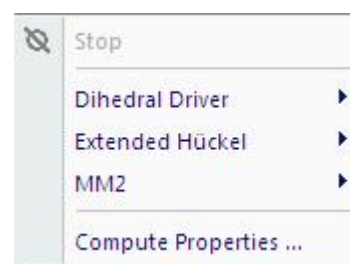
соответствие отсутствует (например, когда молекула рисовалась вручную), то делаются необходимые исправления в ее структуре.

Функция **Bond Proximate** (Связать ближайших) создает химическую связь между двумя ближайшими атомами. Ближайшими в программе считаются два атома, расстояние между которыми меньше, чем принятое стандартное значение для длины связи плюс некоторое значение, величину которого (в процентах от длины связи) можно изменить в настройках пункта меню **View/Settings/Building**.

Некоторые молекулы (амины, карбоновые кислоты) имеют неподеленные электронные пары, их можно добавлять и удалять при модификации построенной модели. После добавления неподеленной электронной пары (функция **Lone Pairs**) ее можно оставить видимой (функция **Lone Pairs - Add & Show**), либо сделать невидимой без изменения химической структуры (функция **Lone Pairs - Hide**). Ещё один вариант, воспользоваться путем **View - Model Display - Show Lone Pairs** и выбрать **Hide** или **Show**.

Функция **Overlay** (Покрывать) покрывает один фрагмент другим с помощью атомных пар. Функция **Dock** (Стыковать) ориентирует один фрагмент относительно другого.

Раздел главного меню **Calculations** содержит несколько полезных расчетных функций. Пункт **Dihedral Driver** (Управляющий двугранными углами) позволяет не только визуально наблюдать за конформациями отдельных частей молекулы (угол поворота 5°), но и рассчитать энергию отдельных



конформаций (ккал/моль) и построить график зависимости энергии от угла поворота (функция **Single Angle Plot** – для вращения относительно одной связи, **Double Angle Plot** – для вращения вокруг двух связей, находящихся у одного атома).

Пункт **Extended Hückel** (Расширенный метод Хюккеля) позволяет рассчитать молекулярную поверхность (**Calculate surfaces**) и заряд (**Calculate charges**) расширенным методом Хюккеля.

Метод Хюккеля – это один из простейших полуэмпирических квантово-химических методов расчета.

Вычисления с его помощью осуществляются наиболее быстро. Следует заметить, однако, что при его использовании не следует забывать о поговорке: «Вам как сосчитать – быстро или точно?». После проведения расчета просмотреть молекулярную поверхность (молекулярную орбиталь) можно с помощью пункта главного меню **Surfaces** (подробнее см. ниже). Аналогичным образом можно отобразить распределение частичных зарядов в молекуле, кроме того результаты расчета будут выведены в окне **Atom properties** (Свойства атома).

Для расчета потенциальной энергии и прочих характеристик молекул существуют эмпирические, полуэмпирические и неэмпирические квантово-механические методы. Такие методы, как CS MOPAC и Gaussian 03 доступны в версии программы ChemBio3D Ultra 11.0. В рассматриваемой Про-версии присутствует метод **MM2** (Молекулярная механика). Общие черты работы с этими методами достаточно близки, поэтому для нашей цели будет достаточно ознакомиться с работой MM2.



Пункт **Run MM2 Job...** (Запустить MM2 задачу) открывает диалоговое окно для выбора файла описания задания MM2 с расширением *.jdf или *.jdt.

Пункт **Setup MM2 Atom Types and Charges** позволяет изменить параметры расчета, используемые по умолчанию.

Пункт **Minimize Energy...** (Минимизировать энергию) запускает процесс минимизации потенциальной энергии молекулы. Пункт **Molecular Dynamics...** (Молекулярная динамика) активизирует молекулярно-динамический эксперимент с возможностью задания температуры, числа итераций и других параметров. Пункт **Compute Properties** (Расчет свойств) позволяет рассчитать свойства молекулы методом MM2. Пункт **Show Used Parameters** (Показать использованные параметры) отображает параметры MM 2 в окне **Output**.

Ovality — отношение площади молекулярной поверхности к площади поверхности сферы эквивалентного объема.

Principal Moments of Inertia (X,Y,Z) — главные моменты инерции относительно соответствующих осей, г/(моль ангстрем²). Главные моменты инерции представляют собой диагональные элементы матрицы тензора инерции, приведенного к главным осям декартовой системы координат, центр которой соответствует центру массы молекулы. В этом случае недиагональные элементы матрицы обращаются в нуль, а диагональные представляют собой компоненты тензора инерции относительно соответствующих осей молекулы.

При расчете площади поверхности молекул, по умолчанию, используется радиус пробной сферы, равный 1.4 ангстрема. При необходимости можно изменить это значение, используя вкладку **Parameters**.

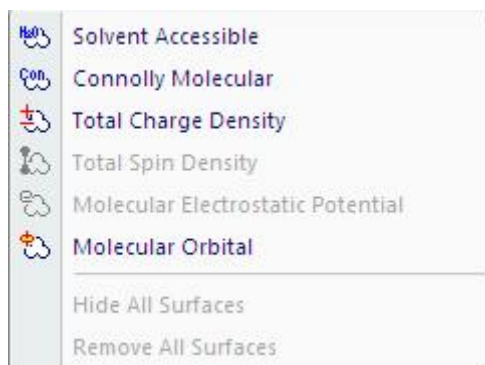
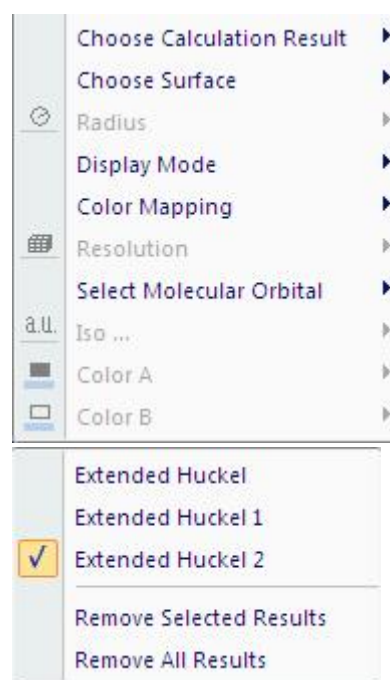
Molecular Formula — брутто-формула соединения (общее количество атомов каждого элемента).

Выбрав необходимые свойства на вкладке **Compute Properties**, нужно нажать клавишу **OK**, и результаты расчетов будут выведены в окно **Output** в нижней части главного окна программы.

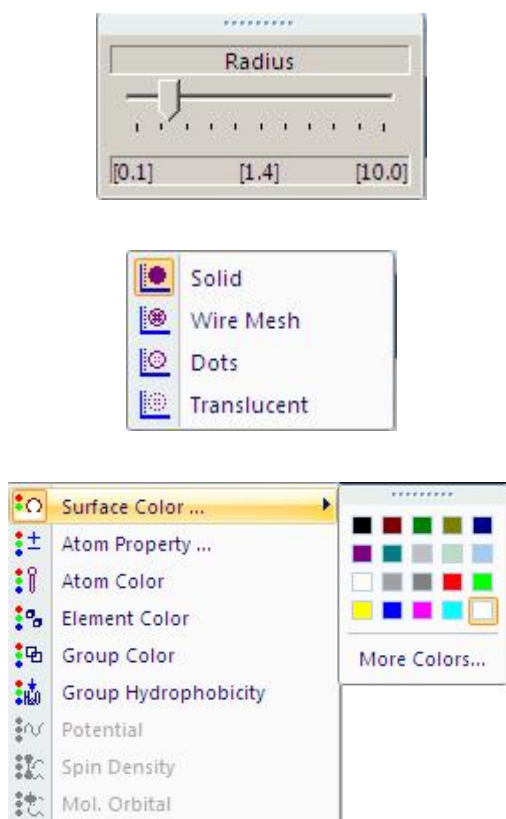
Пункт главного меню **Surfaces** (Поверхности) позволяет визуализировать результаты некоторых квантово-химических расчетов, например, ВЗМО (НОМО) и НСМО (LUMO). Для этого необходимо провести собственно расчет (пункт **Calculations** главного меню) тем или иным методом. Расчет может быть несколько, с помощью пункта **Choose Calculation Result** (Выбрать результат вычислений) выбрать требуемый результат.

Здесь же можно удалить отдельный результат или все.

Пункт **Choose Surface** (Выбрать поверхность) дает возможность выбрать несколько видов изображения молекулы.



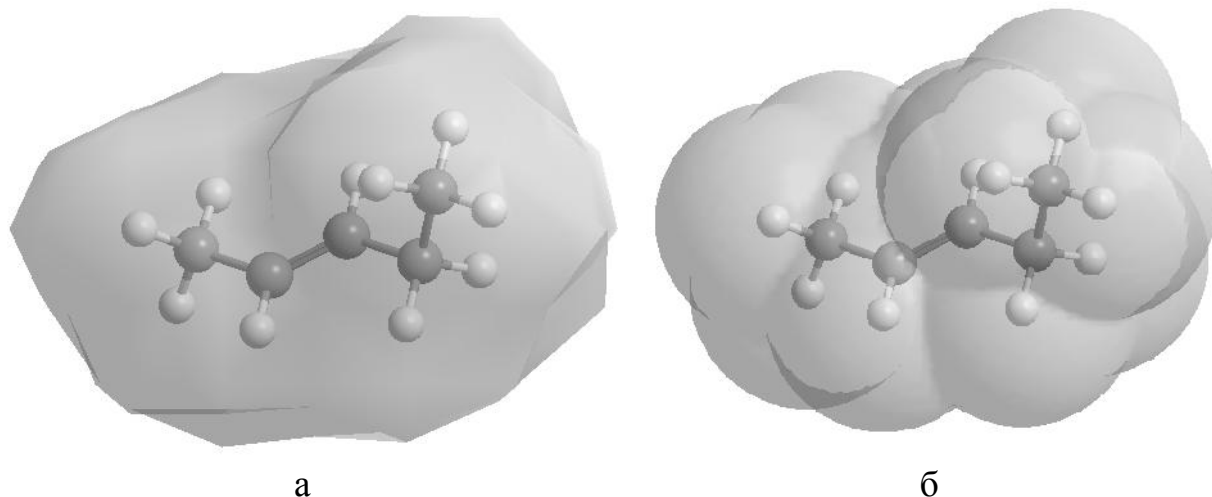
Пункт **Solvent Accessible** (Поверхность, доступная растворителю) отображает модель молекулы в виде поверхности, доступной молекулам растворителя. Поверхность изображается на основании расчета методом Конолли площади, заметаемой центром пробной сферы (моделирующей растворитель) при ее мысленном прокатывании по поверхности



исследуемой молекулы. При этом атомы в модели молекулы представляются в виде сфер с радиусами, равными вандерваальсовым радиусам соответствующих атомов. Величину радиуса, Å, можно выбрать в пункте меню **Surfaces – Radius**. По умолчанию, радиус растворителя установлен равным 1.4 Å, соответствующим воде. Внешний вид поверхности (твердая, в виде сетки, точечная, с тенями подсветки) выбирается в пункте меню **Surfaces – Display Mode**. Пункт меню **Surfaces – Color Mapping** (Раскрашивание) предлагает настройки цвета отображения поверхности, заряда атомов, отдельных атомов, элементов и групп, гидрофобности групп.

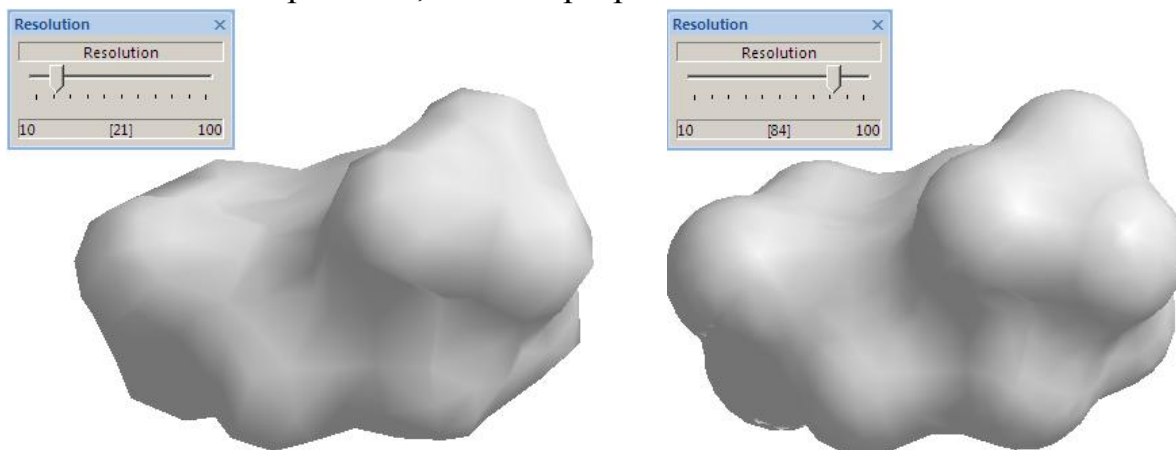
Пункт меню **Surfaces – Resolution** (Разрешение) изменяет качество отображаемой поверхности от грубого до тонкого.

При низком разрешении поверхность, доступная растворителю, становится почти эллипсоидальной, тогда как при высоком разрешении она почти повторяет исходную модель молекулы. Поверхность модели молекулы пентена-2, доступная растворителю, с разрешением 10 (а) и 100 (б):



Пункт **Connolly Molecular** (Молекулярная поверхность Конолли) предлагает аналогичные настройки. В данном случае для построения поверхности используется другой алгоритм Конолли, в котором поверхность определяется контактом с молекулой растворителя – сферой с заданной величиной вандерваальсова радиуса. Алгоритм Конолли дает более детальную оценку поверхности, чем алгоритм расчета поверхности, доступной

растворителю. В этом пункте также доступны настройки радиуса, внешнего вида и цвета поверхности, а также разрешения.

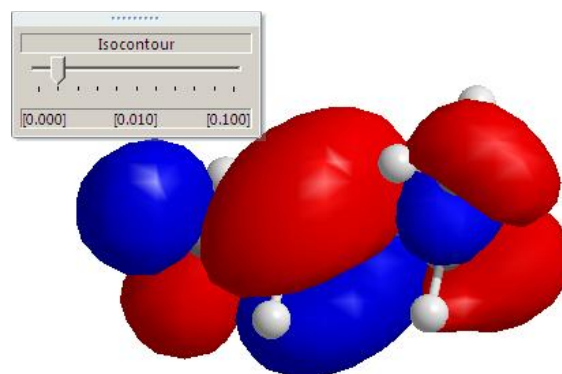


Пункт **Total Charge Density** (Общая плотность заряда) позволяет визуализировать пространственную плотность распределения заряда – электронную плотность в пространстве, окружающем ядро молекулы. Здесь также доступны различные варианты настройки внешнего вида.

Пункт **Total Spin Density** (Спиновая плотность) описывает пространственное распределение разницы в плотностях между $\uparrow$ -спиновыми и $\downarrow$ -спиновыми электронами в данной точке.

Пункт **Molecular Electrostatic Potential** (Молекулярный электростатический потенциал) позволяет оценить распределение молекулярного электростатического потенциала, который характеризует притяжение или отталкивание между молекулой и протоном в данной точке. Притяжение определяется отрицательными значениями потенциала, а отталкивание – положительными.

Пункт **Molecular Orbitals** (Молекулярные орбитали) позволяет показать поверхности, визуальное отображающие различные стабильные электронные распределения в молекуле. Расчет их может быть проведен квантово-химическими методами.



Пункт меню **Surfaces – Select Molecular Orbital** дает список молекулярных орбиталей с указанием их энергии, эВ.

Пункт меню **Surfaces – Isocontour (Isocharge)** позволяет показать поверхности с одинаковыми значениями параметров или заряда.



Пункт главного меню Online позволяет зарегистрированным пользователям искать необходимую информацию в онлайн-базах данных либо с сайта фирмы-производителя.

Пункты главного меню Window и Help аналогичны по своим функциям и наполнению таким же пунктам других стандартных приложений Windows.

Окна редактора таблиц для просмотра и редактирования параметров молекулярных моделей в зависимости от версии программы могут иметь разный внешний вид, состав пунктов может отличаться.

Основные панели программы Chem3D Pro 11.0

Набор и комплектацию панелей можно изменять с помощью пункта меню **View – Toolbars** или непосредственно на самой панели с помощью стрелки-треугольника **Toolbar options**.

Стандартная панель  (**Standard Toolbar**) имеет небольшой набор необходимых средств, состав и назначение которых аналогичны другим приложениям Windows.

Панель построения модели (**Building model toolbar**)

 Кнопка **Selection Tool** позволяет выбрать индивидуальные атомы или связи. С помощью нажатой клавиши **Shift** можно выбрать группы атомов или связей.

 Кнопка **Translation Tool** позволяет перемещать выбранные объекты по рабочему полю.

 Кнопка **Rotate** вращает целую модель вокруг осей X, Y или Z относительно выбранных связей или аналогично трекболу (для выбора дополнительных функций воспользуйтесь стрелкой-треугольником в правом нижнем углу кнопки).

 Кнопка **Zoom Tool** позволяет уменьшить/увеличить масштаб изображения в окне визуализации.

 Кнопка **Move object** передвигает отдельные атомы или части молекулы без разрыва химических связей.

 Кнопки **Bond (Single/Double/Triple/Dummy)** создают одинарную/двойную/тройную/некоординированную (с неспаренным электроном) химическую связь

 Кнопка **Text building tool** позволяет ввести новый элемент, тип атома, формальный заряд или порядковый номер для выбранного атома молекулы, кроме того, дает возможность заменить тип выбранных атомов. Если щелкнуть по пустому месту в окне визуализации, то будет дана возможность создать новый фрагмент, просто записав формулу, например, C_2H_5OH .

 Кнопка **Eraser Tool** позволяет «стирать» атомы и связи.

Панель анимации (**Demo Toolbar**) предназначена для создания различных эффектов, сопровождающих демонстрационное движение модели.

 Кнопки **Spin** и **Rock** заставляют молекулу вращаться в одном направлении или из стороны в сторону.

 Кнопка **Axis** позволяет выбрать ось, относительно которой будет осуществляться вращение (X, Y, Z или другая выбранная ось).

 Кнопка **Rotation speed** позволяет регулировать скорость вращения от 0.1 до 5.0 оборотов в минуту.

 Кнопка **Rock Amplitude** позволяет изменять амплитуду колебаний в режиме **Rock** от 1 до 180° .

 Кнопка **Stop** останавливает движение модели.

Панели **Model Display**, **Surfaces**, **Calculation** содержат кнопки, аналогичные по функциям пунктам, описанным в соответствующих разделах главного меню.

2.3. Редактирование и анализ геометрии трехмерных моделей молекул

Использование двумерной модели

Двумерная модель в виде структурной формулы соответствующего соединения может быть создана в приложении CS ChemDraw или в другом химическом редакторе, например, ISIS/Draw, а затем перенесена в окно Chem3D через буфер обмена Windows при помощи операций «копировать» и «вставить». При вставке в окно Chem3D структурная формула автоматически преобразуется в трехмерную модель, при этом соответствующим длинам валентных связей и углов между атомами присваиваются стандартные для данных элементов значения. Для тех редакторов, с которыми Chem3D не поддерживает интерфейса через буфер обмена Windows, импорт модели может быть осуществлен через файл одного из стандартных химических форматов (файлы с расширением .alc, .mol, .msm, .mor и многие другие).

Написание брутто-формулы соединения в рабочем поле окна

После нажатия кнопки **Text** на панели инструментов курсор приобретает вид перекрестья с буквой «А» в центре. Если кликнуть мышью в любом месте рабочего окна, появляется поле ввода текста, в котором можно заглавными латинскими буквами набрать брутто-формулу соответствующего соединения, например, $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_2\text{C}_6\text{H}_5$. После нажатия клавиши ввода в рабочем окне будет создана трехмерная модель соответствующего соединения. Следует иметь в виду, что одной и той же брутто-формуле могут отвечать различные структурные изомеры, поэтому возможно, что созданная модель потребует затем дальнейшего редактирования.

Непосредственное редактирование с использованием кнопок на панели инструментов

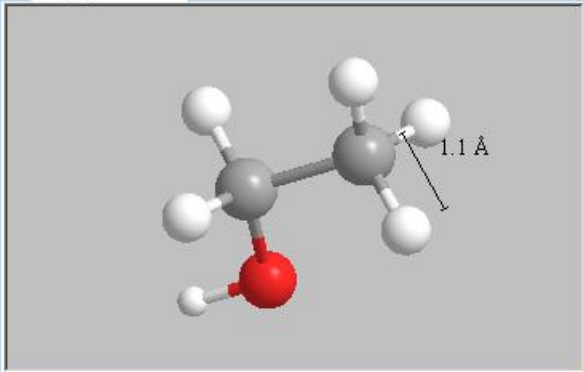
Этот способ является основным, поскольку позволяет создать трехмерную модель любой сложной конфигурации. При нажатии одной из кнопок на панели инструментов, соответствующей одинарной (наклонная черта), двойной (две наклонных черты) или тройной (три наклонных черты) связи, курсор в рабочем поле окна принимает вид перекрестья. Для того чтобы получить трехмерную модель молекулы из двух углеродных атомов, достаточно провести черту при помощи левой клавиши мыши в рабочем поле окна. Нужное количество атомов водорода, соответствующее выбранному типу связи, будет добавлено автоматически. Дальнейшее редактирование может проводиться добавлением новых связей взамен выбранных атомов водорода, изменением геометрии модели, путем перетаскивания мышью выбранных атомов, созданием циклов, путем переноса и последующего наложения нужных атомов углерода, образующих цикл, изменением типа связи. Для того чтобы изменить тип связи, нужно щелкнуть кнопку на панели инструментов, соответствующую нужному типу связи, и с нажатой клавишей мыши соединить чертой два выбранных атома углерода. Для создания модели с гетероатомами, например, кислорода или азота, нужно выбрать на панели инструментов кнопку текстового ввода, выделить щелчком мыши нужный атом (водорода или углерода) и набрать в текстовом поле символ необходимого атома или брутто-формулу заместителя. В процессе редактирования возможно вращение созданной модели или отдельных ее частей в пространстве, изменение размеров отображаемой области, отражение и перемещение. Вращение модели в двух перпендикулярных плоскостях производится при помощи полос прокрутки в нижней и правой частях рабочей области окна. При помещении курсора в область полос прокрутки он приобретает вид ладони. Перемещая в таком состоянии

курсор с нажатой левой клавишей мыши вдоль полосы прокрутки, можно вращать модель вокруг горизонтальной и вертикальной оси (правая вертикальная и нижняя полосы прокрутки, соответственно). Если необходимо вращать отдельные элементы модели вокруг выбранной связи, нужно выделить нужную связь, выбрав щелчком мыши один или более нужных атомов. Выбор атомов производится при нажатой кнопке **Selection Tool** на панели инструментов. При необходимости выделить несколько атомов, нужно щелкать на них, удерживая нажатой клавишу **Shift**, или обвести атомы рамкой с нажатой клавишей мыши. Вращение группы атомов вокруг выделенной связи производится перемещением левой вертикальной полосы прокрутки. Выбор клавиши **Rotate** на панели инструментов позволяет одновременно вращать модель в двух плоскостях в произвольном направлении. Изменение размеров отображаемой области может осуществляться нажатием кнопки **Zoom Tool** или одновременным нажатием клавиш A, Q, W (выбор вида, фокуса, центра) и клавиш +/- (увеличить/уменьшить) основной клавиатуры. Чтобы переместить в плоскости экрана группу атомов, нажмите кнопку **Move object**, выделить нужную группу и, установив указатель курсора на один из выделенных атомов, перемещайте по экрану с нажатой левой клавишей мыши.

После того, как создана пространственная модель исследуемого соединения, могут быть изучены, а при необходимости изменены геометрические параметры модели – длины связей и валентные углы между атомами. Анализ геометрии модели производится выбором вкладки меню **Structure\Measurements**, в котором можно выбрать соответственно пункты **Display** (показать в окне визуализации) **Distance/Bond/Dihedral Measurement** или **Generate** (показать в виде таблицы в окне Measurement) **All Bond Lengths/Angles/Dihedral Angles/Close Contacts**.

Для удобства в окне указываются порядковые номера атомов. Чтобы видеть их в окне визуализации необходимо выбрать пункт меню **View – Model Display – Show Serial Numbers**. Если в окне **Measurement** отметить галочкой ячейку **Display** рядом с соответствующим параметром, то численное значение этого параметра будет показано в окне визуализации.

	Display	Atoms	Actual (° / Å)	Optimal (° / Å)
1	☐	C(12)-O(14)	1.4080	1.4080
2	☐	O(14)-H(20)	0.9610	0.9610
3	☒	C(13)-H(18)	1.1144	1.1130
4	☐	C(13)-H(17)	1.1144	1.1130
5	☐	C(13)-H(19)	1.1148	1.1130
6	☐	C(12)-H(16)	1.1110	1.1110
7	☐	C(12)-H(15)	1.1110	1.1110
8	☐	C(12)-C(13)	1.5140	1.5140

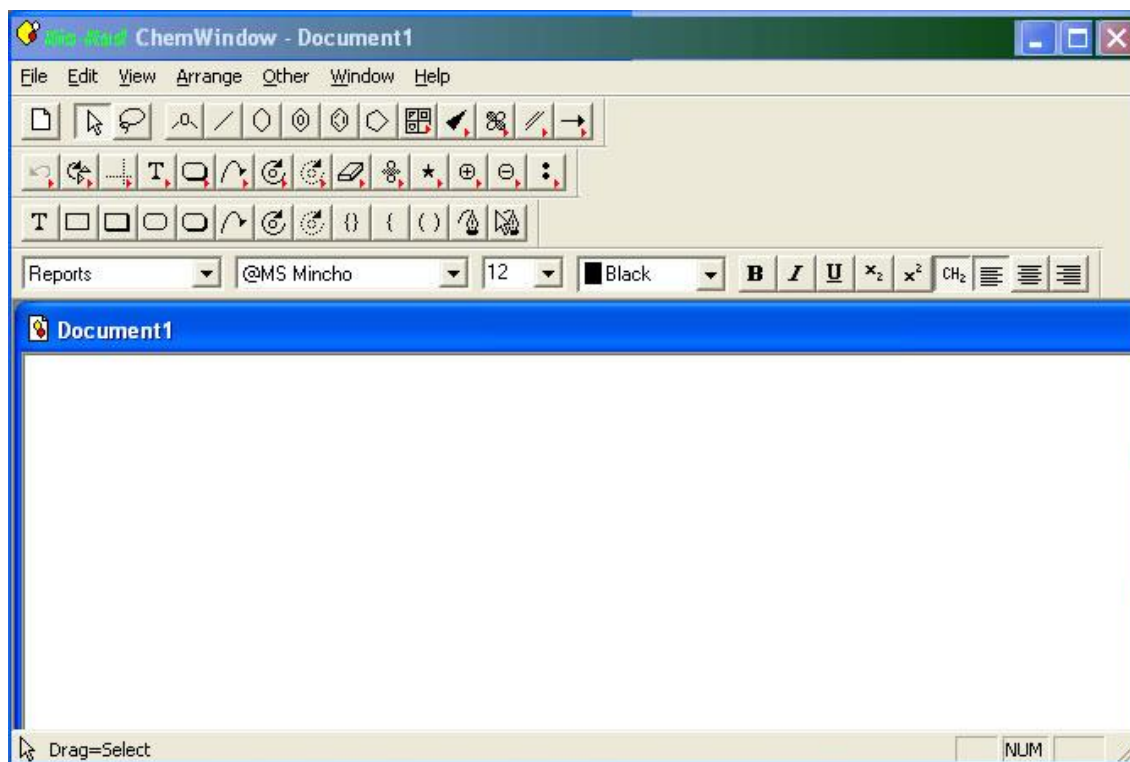


При отображении геометрических параметров модели в окне **Measurements** справа от поля с обозначением атомов, к которым относится соответствующий параметр (например, длина связи), выводятся два числовых поля **Actual** и **Optimal**. В поле **Actual** содержатся действительные значения параметра модели (например, длина соответствующей связи в ангстремах), в поле **Optimal** выводятся значения данного параметра, устанавливаемые для данной группы атомов по умолчанию в базе данных Chem3D. Для того чтобы изменить какой-либо из геометрических параметров модели, достаточно щелкнуть мышью в поле **Actual** для соответствующей группы атомов и набрать на клавиатуре нужное значение. После нажатия клавиши **Enter** в окне модели будет изменен соответствующий размер. Для того чтобы присвоить всем длинам связей и валентным углам стандартные для соответствующих элементов значения, необходимо выделить мышью нужную часть модели или все соединение и выбрать пункт меню **Structure – Clean Up**.

3. ПРОГРАММА CHEMWINDOW

3.1. Общая характеристика редактора ChemWindow

Программа разработана фирмой BioRad Laboratories (BIORAD) (США) и получила большое распространение среди химиков, хотя не являлась свободно распространяемой программой. Программа очень удачная и широко используется в настоящее время. Программа разрабатывается и сейчас как коммерческий продукт в составе программного комплекса KnowItAll!.



Основное окно программы показано на рисунке выше и организовано по стандартным для Windows-приложений с многооконным интерфейсом правилам.

Работа с программой построена аналогично работе с другими графическими редакторами. Для выполнения действия (рисование фрагмента, химической связи, определение метки атома и т.д.) сначала выбирается соответствующий инструмент (на панели инструментов вверху, между рабочей областью и строкой меню), а затем в рабочем поле с помощью манипулятора мышь выполняется действие. Кнопки с красным треугольником в правом нижнем углу – настраиваемые. При нажатии на треугольник появляется табло с выбором большого количества инструментов. Выбранная кнопка затем сохраняется для повторного использования.

Особенностью программы ChemWindow является наличие богатой библиотеки (Library) формул различных соединений и возможность создавать и использовать собственные библиотеки. Библиотеки находятся в пап-

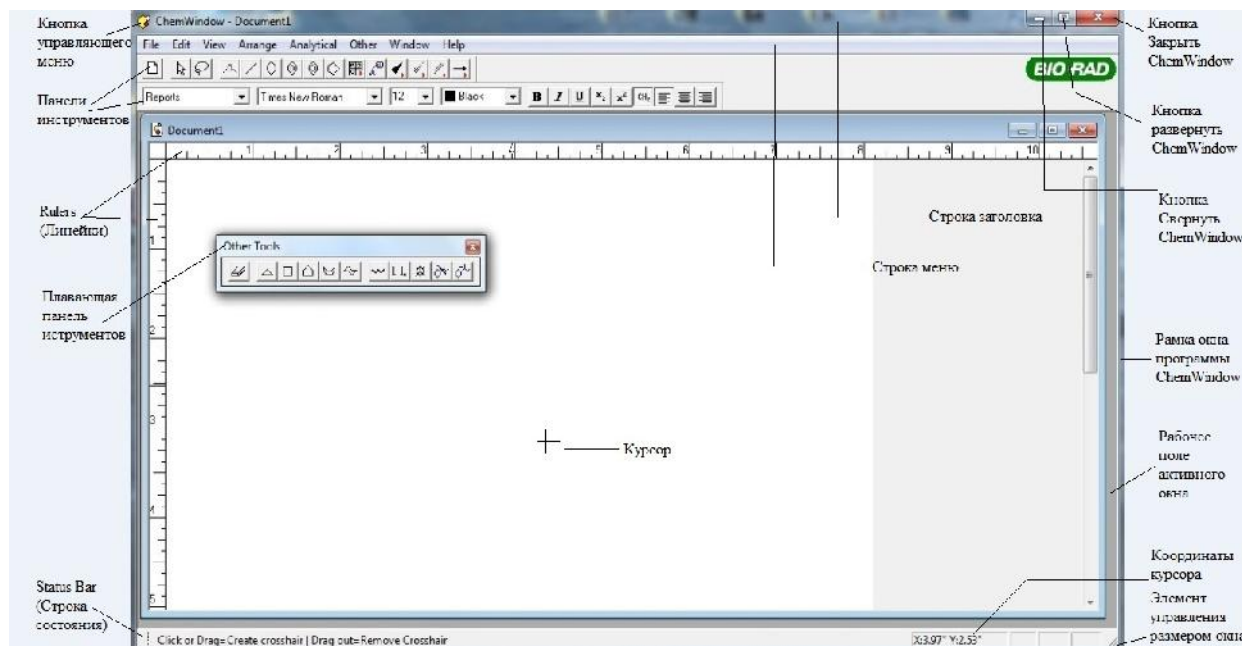
ке, которая создается при установке программы. Библиотеки открываются в отдельном окне, и необходимые формулы из нее можно просто «перетащить» с помощью указателя мыши или скопировать традиционным образом через буфер обмена.

Кроме структурных формул, есть также библиотека рисунков лабораторной посуды, что позволяет очень легко создавать рисунки сложных лабораторных установок. Ниже приведен пример создания рисунка лабораторной установки для перегонки при нагревании. Сначала открывается файл библиотеки LabGlass, затем из библиотеки переносятся необходимые элементы – круглодонная колба для дистиллируемой смеси, насадка на нее, водяной холодильник, алонж и приемная колба. Затем эти элементы соединяются между собой. Причем программа ChemWindow помогает в этом. При сближении соединительных элементов химической посуды они как бы «щелкаются», при этом даже производятся очевидные необходимые повороты (пример – присоединение водяного холодильника, который в библиотеке был вертикален, а при присоединении стал наклонным).

ChemWindow поддерживает технологию OLE (Object Linking and Embedding) и так же, как и другие химические редакторы, может вставляться в виде объекта в текстовые документы MS Word (объект с названием "Bio-Rad Structure").

3.2. Запуск и рабочее окно программы ChemWindow

Окно ChemWindow состоит из строки меню, панелей инструментов (количество и состав этих панелей можно настраивать), произвольного числа окон, среди которых одно является активным.



Работа с меню File (Файл)

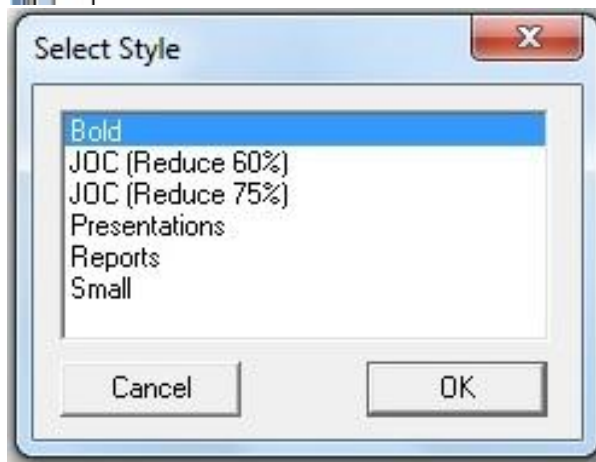
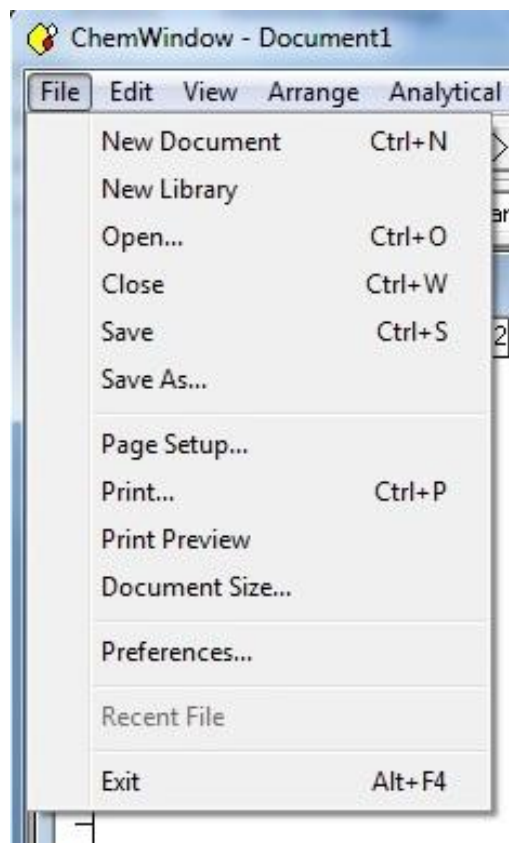
Меню **File** (Файл) содержит команды, позволяющие работать с файлами на дисках: создавать их, открывать, сохранять и т.п. С помощью этого меню можно вводить информацию о принтере, печатать файлы и выходить из **ChemWindow**.

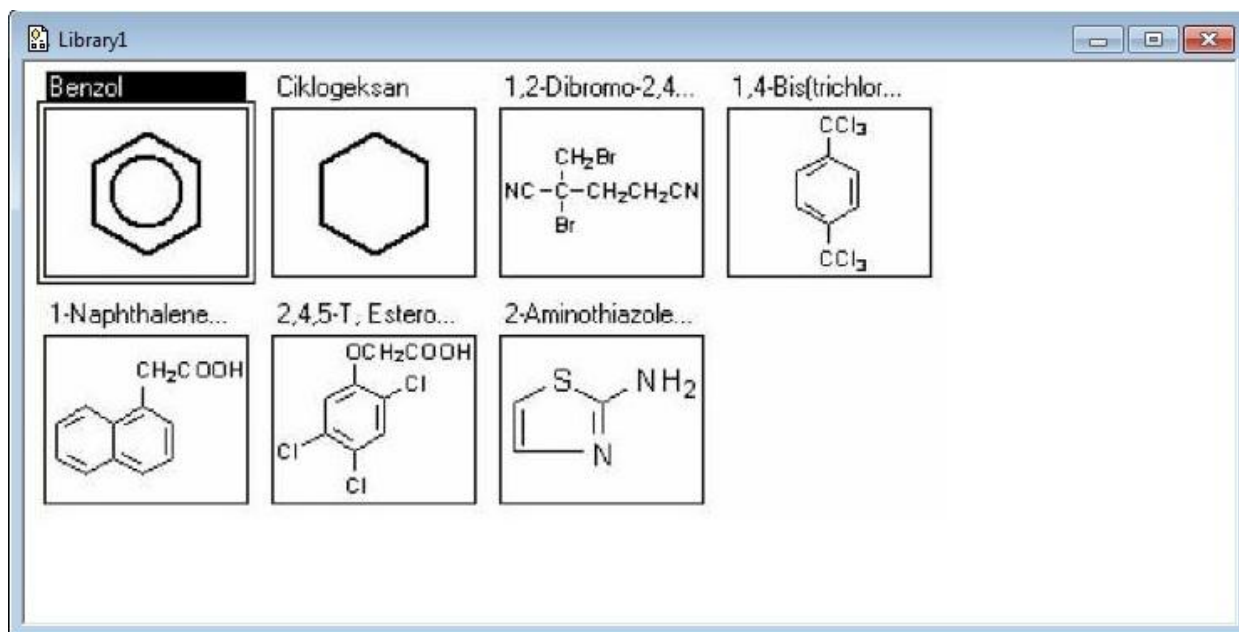
Вход в меню осуществляется наведением указателя мыши на слово **File** в строке меню или нажатием комбинации клавиш Alt+F на клавиатуре.

New Document (Новый документ) – комбинация клавиш Ctrl+N дает возможность создать и открыть новый файл. Когда вы выбираете эту команду, появляется диалог **New**.

В открывшемся окне пользователю предлагается выбрать **Style** (Стиль), которым будет оформлен новый документ.

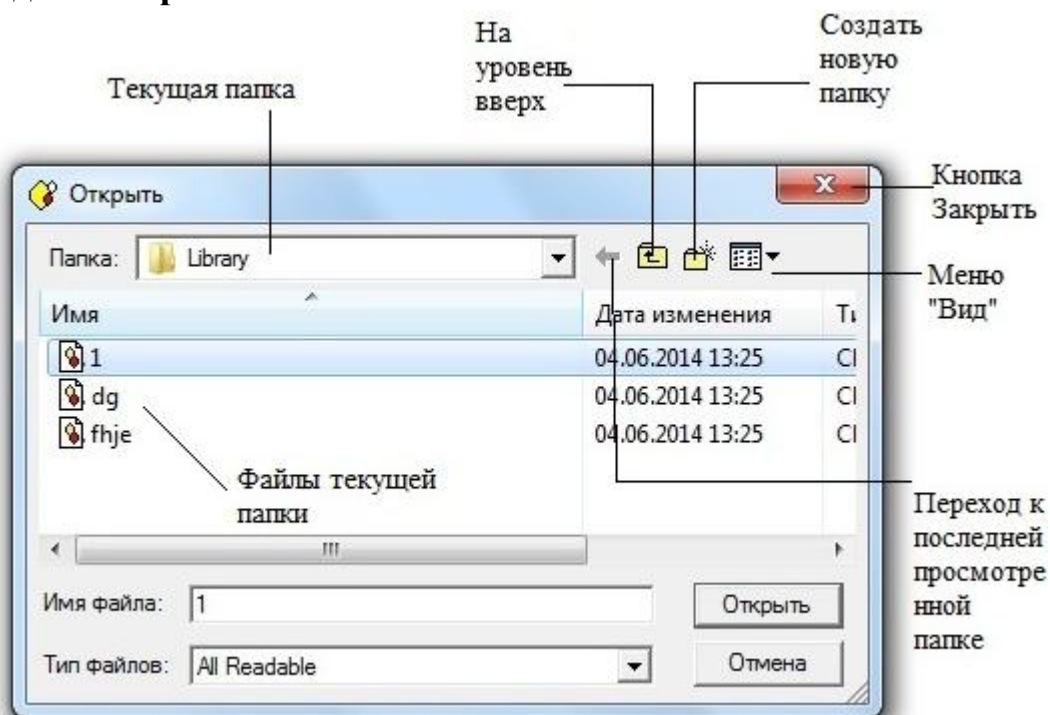
Команда **New Library** (Новая библиотека) создает новую библиотеку. При выполнении этой команды будет открыт пустой документ - это новая библиотека. Чтобы поместить в нее новую структуру, необходимо ее предварительно создать в отдельном документе. Затем, используя команды редактирования документа, переместите созданную структуру в новую библиотеку. Появится диалоговое окно, в которое вам будет предложено ввести название для каждой новой структуры, которую добавляют в библиотеку. К сожалению, в существующих версиях ChemWindow можно использовать только названия, составленные с помощью латинского алфавита. (*Русский язык не поддерживается!*). Нажав клавишу OK, вы вводите новую структуру в библиотеку или, щелкнув клавишу Cancel, отменяете это действие.





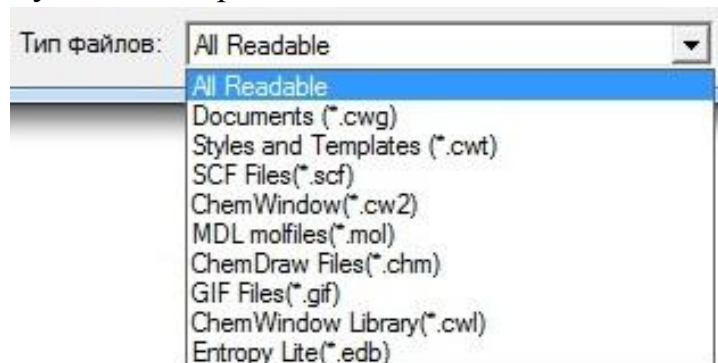
Двойной щелчок мышью на изображении вызовет появление диалога, в котором вводится название структуры. Вы можете изменить название или ввести новое. Используя команды редактирования документа, можно копировать, удалять, вставлять структуры в данную библиотеку и в другие открытые окна программы ChemWindow или в другие программы (например, текстовые редакторы). Файлы библиотеки сохраняются с расширением .cwl.

Команда **Open** (Открыть), замена – комбинация клавиш **Ctrl+O**, открывает существующий файл (документ). При выборе этой команды открывается диалог **Open**.



Диалог **Open** приведен на русском языке, так как используются стандартные библиотеки установленной русифицированной версии операцион-

ной системы Windows. Такая ситуация может наблюдаться и в других аналогичных случаях. В этом диалоге отображаются все файлы каталога, относящиеся, в соответствии с расширениями их имен, к определенному типу, указанному в поле **Тип файлов**. Файлы заданного типа отображаются в алфавитном порядке. Если нужный вам файл находится в другой **Папке** или **Диске**, то найти нужный файл можно, используя кнопку (На уровень вверх). В поле **Тип файлов** можно выбрать тип файла. Нажимая на кнопку рядом со списком **Тип файлов**, вы получите список возможных типов файлов, которые могут быть открыты в ChemWindow.



По умолчанию установлено **All Readable**, т.е. все поддерживаемые, перечисленные выше. Если вы измените расширение, то станут доступны только файлы выбранного формата, остальные будут невидимы.

После того как вы укажете конкретный файл (мышкой или с помощью клавиатуры, как описано ранее), который хотите открыть, и нажмете кнопку **Открыть**, этот файл будет доступен для работы в программе ChemWindow. Открыть файл можно, быстро щелкнув по нему два раза мышкой.

Команда **Close** (Заккрыть), замена – комбинация клавиш Ctrl+W, закрывает файл, находящийся на переднем плане. Вы также можете закрыть окно, дважды щелкнув кнопку управляющего меню или нажав на кнопку X, расположенную в правом верхнем углу окна.

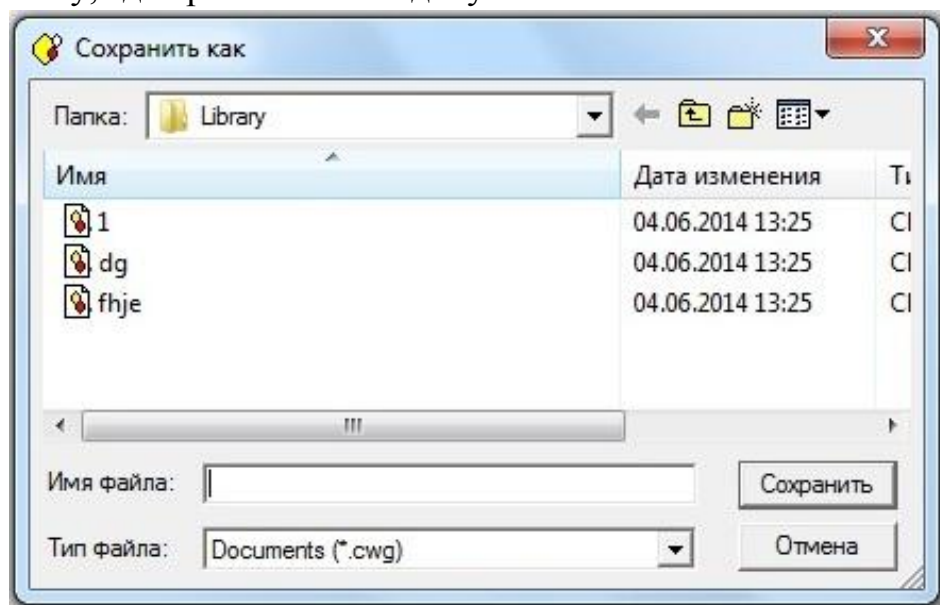
Команда **Save** (Сохранить), замена - комбинация клавиш Ctrl+S, сохраняет все изменения, внесенные в текущий файл, при этом файл не закрывается. Если активны несколько окон редактирования, сохраняются изменения только того окна, которое находится на самом переднем плане.

Если вы выбрали команду **Save** в момент, когда файл еще ни разу не сохранялся и не имеет имени, появится диалог **Save As**.

Команда **Save As** (Сохранить как...) позволяет присвоить имя новому файлу и сохранить его или сохранить копию текущего файла под новым именем. Нажмите кнопку **Save As** - появится диалог **Save As**.

При появлении этого окна курсор будет мигать в поле **Имя файла**,

приглашая пользователя ввести имя файла. По умолчанию вам предлагается сохранить файл в папку ChemWin. Однако лучше всего сохранить в специальную папку, где хранятся ваши документы.

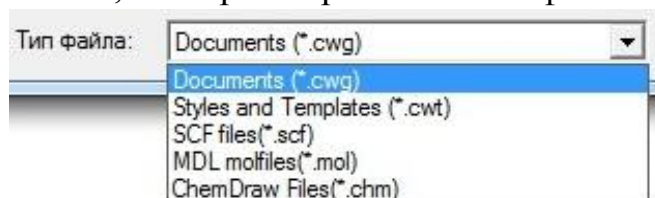


Если вы впервые сохраняете данный файл, он запишется на диск, а имя файла перейдет в заголовок окна.

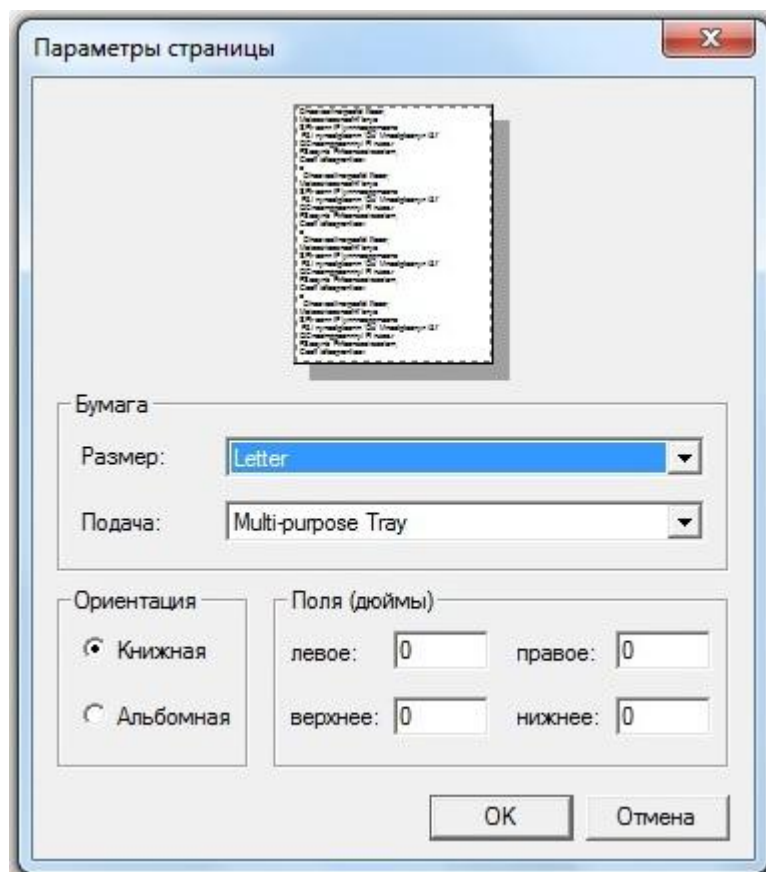
Если сохраняете копию существующего файла, появится новое окно редактирования, заголовком которого будет служить новое имя файла. Старый файл закрывается. Если последние изменения старого файла не были сохранены до создания нового файла, они не будут внесены в старый файл, но появятся в новом файле.

По умолчанию файл сохраняется в «родном» формате программы ChemWindow *.cwg. Однако вы можете сохранить текущий файл в другом формате, нажав на кнопку рядом со списком **Тип файла**. При этом получите список возможных типов файлов, в которые можно сохранить текущий документ.

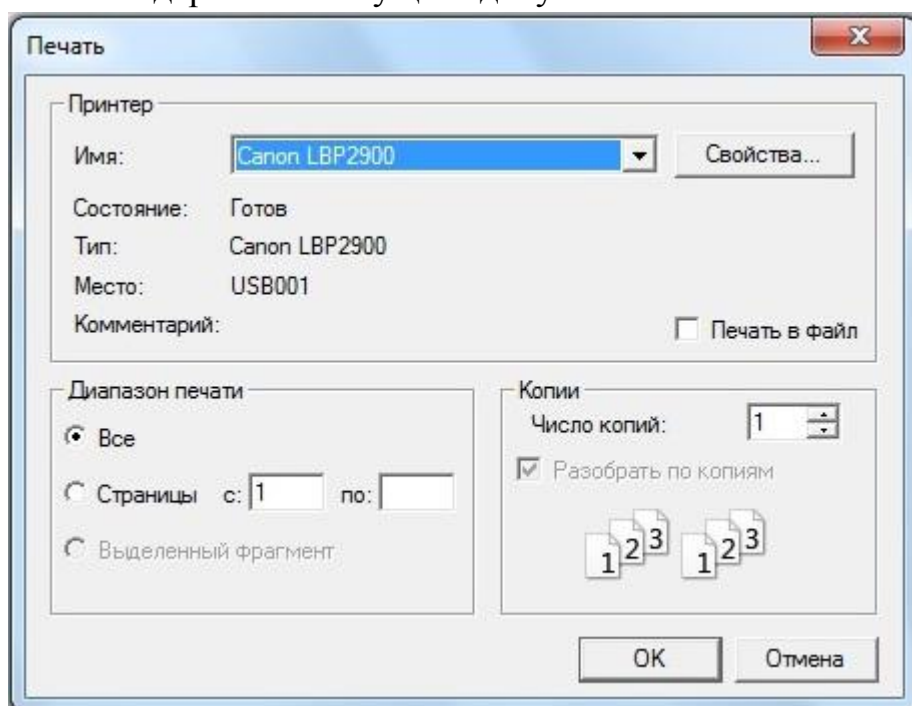
Как видно на рисунке, количество поддерживаемых форматов файлов при сохранении меньше, чем при открытии. Типы файла в меню **Save As**:



Команда **Page Setup** (Параметры страницы) устанавливает размер текущей страницы, ориентацию страницы, поля от края страницы. Также отсюда можно перейти в раздел установок принтера. После выбора необходимых параметров страницы вы должны нажать кнопку ОК, чтобы эти настройки вступили в силу.



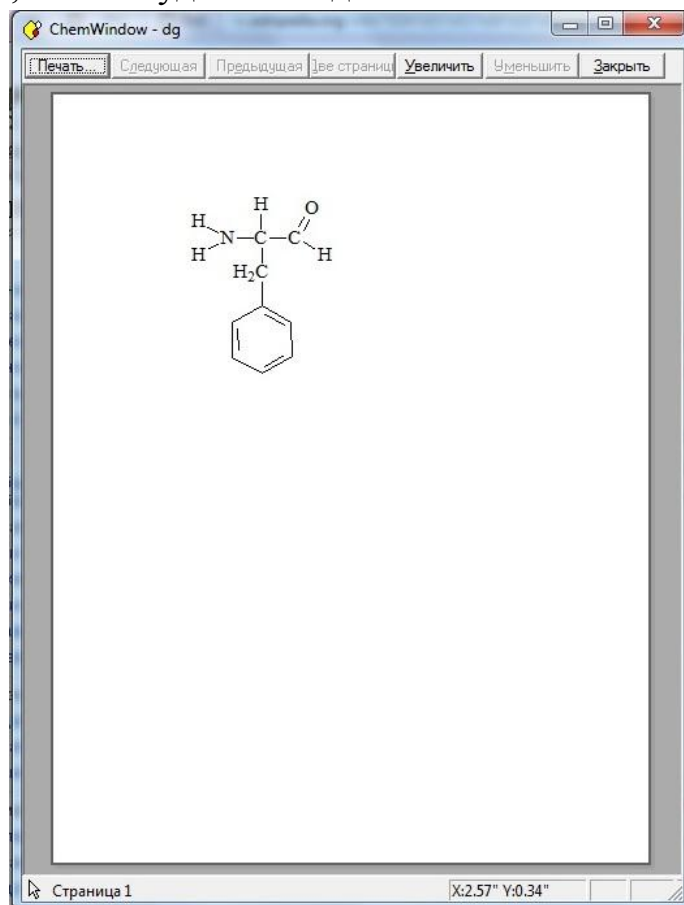
Print (Печать) – комбинация клавиш Ctrl+P, отображает диалог **Печатать** и печатает содержимое текущего документа.



В открывшемся диалоге необходимо указать принтер, на котором необходимо осуществить печать, установить диапазон печати (по умолчанию весь активный документ), указать число копий. Нажав кнопку ОК, вы напечатаете на выбранном принтере.

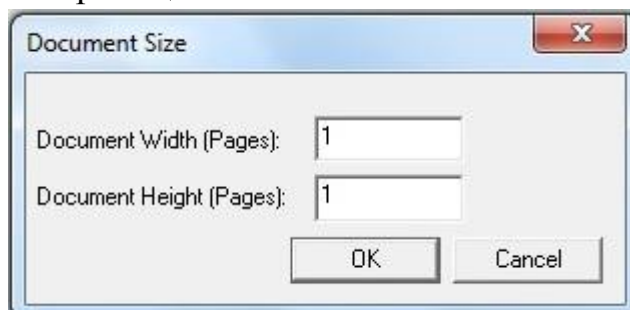
Команда **Print Preview** (Просмотр печати) отображает макет текуще-

го документа так, как он будет выглядеть после печати на бумаге.



Как видно на рисунке, можно изменить масштаб изображения, используя для этого кнопки **Увеличить** и **Уменьшить**. Если страниц несколько, то можно перемещаться между страницами вперед и назад, нажимая кнопки **Следующая**, **Предыдущая** или **Две страницы**, чтобы увидеть, как выглядят сразу две страницы. Из режима **Print Preview** есть возможность сразу отправить документ на печать, нажав кнопку **Печать**. Для того чтобы выйти из этого режима, нужно нажать кнопку **Заккрыть**.

Команда **Document Size** (Размер документа) устанавливает размер текущего документа в страницах.



По умолчанию установлен размер документа - 1 страница. Вызвав эту команду меню, вы можете изменить размер документа (в страницах), указав его ширину (**Document Width**) или высоту (**Document Height**). Установить размер страницы можно в разделе **Page Setup**.

Команда **Preferences** (Установки) устанавливает основные параметры

для программы ChemWindow:

Folder For Template (Папка для шаблонов) устанавливает папку, в которой находятся файлы шаблонов;

Template File (Файл шаблона) устанавливает файл шаблона, который будет использован ChemWindow при запуске. Структуры, которые содержатся в этом файле, будут отображены на специальной панели **Template Tools**;

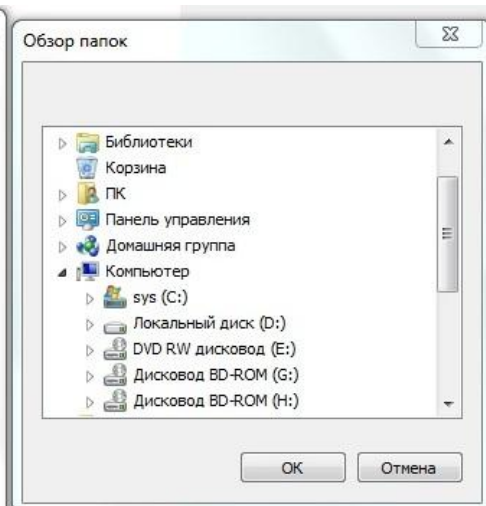
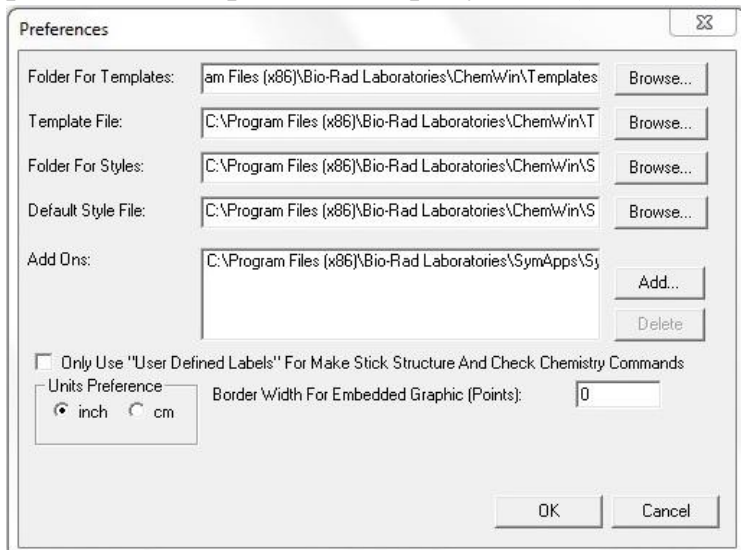
Folder For Styles (Папка для стилей) устанавливает папку, в которой находятся файлы стилей;

Default Style File (Файл стиля по умолчанию) устанавливает файл стиля, который будет использован ChemWindow при запуске по умолчанию. Вообще в программе ChemWindow существует несколько встроенных (поставляемых вместе с программой) стилей (Reports, Bold, Small, Presentations, JOC (Reduce 60 %), JOC (Reduce 75 %)).

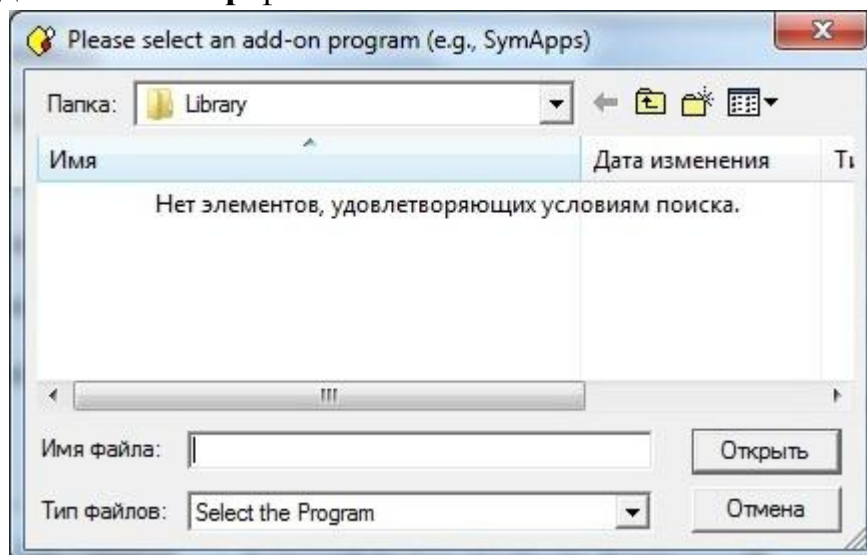
Чтобы указать местоположение папки или файла, нужно нажать кнопку **Browse**. При этом появится диалог **Обзор папок**, в котором вы должны выбрать соответствующую папку или файл. **AddOns** указывает путь для программ, которые расширяют возможности ChemWindow (SymApps, IRKeeper, ChromKeeper и др.). Чтобы добавить программу, нужно нажать кнопку **Add**, при этом появится диалог, аналогичный показанному на рисунке. Добавленная программа появится в меню **Other**. Если нужно удалить программу из списка, то мышкой указать соответствующую программу в списке, нажать кнопку **Delete**, которая станет активной, и выбранная программа будет удалена из списка.

Units Preference – зависимый переключатель, который позволяет указать единицы измерения, используемые по умолчанию: сантиметры (cm) или дюймы (inch).

Border Width For Embedded Graphic (Points) указывает толщину рамки для встраиваемых рисунков (в точках).



Вид диалога **Выбор файла:**



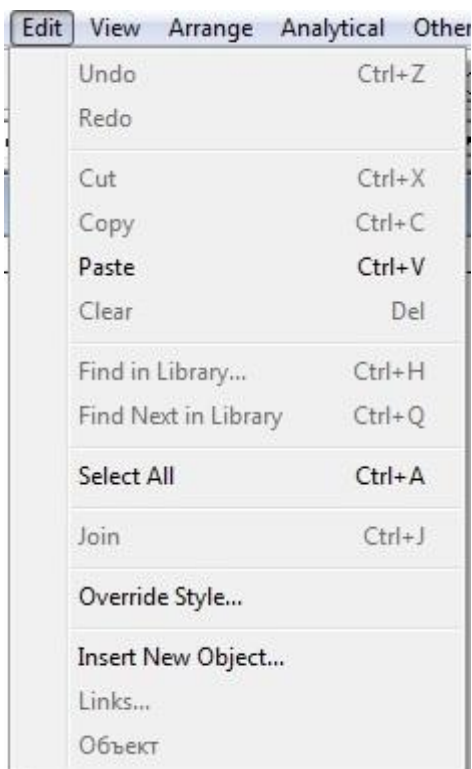
ChemWindow запоминает четыре последних открытых файла. Поэтому при работе с одним и тем же файлом удобнее открыть его непосредственно прямо в меню **File**, а не используя диалог **Open**.

Вид последнего открытого файла:

Команда **Exit** (комбинация клавиш Alt+F4) завершает сеанс ChemWindow и возвращает вас в основной экран Windows.

Preferences...	
1 dg	
2 fhje	
3 1	
4 C:\Users\ПК\Documents\2	
Exit	Alt+F4

Работа с меню **Edit** (Редактировать)



Меню **Edit** содержит команды, которые используются в процессе редактирования создаваемых структур, текста и встраиваемых объектов OLE.

Вход в меню осуществляется путем наведения указателя мыши на слово **Edit**, в строке меню или нажатием комбинации клавиш Alt+E на клавиатуре.

Undo (Откат), замена - комбинация клавиш Ctrl+Z или Alt+Back Space, отменяет последние действия, выполненные при использовании команд построения химических структур. Если повторить команду **Undo** несколько раз подряд, можно отменить все выполненные действия вплоть до начала текущего сеанса редактирования.

Если вы отменили действие командой **Undo**, а потом передумали, то восстановить прежний вид окна редактирования той же командой **Undo** нельзя. Чтобы отменить последнюю операцию, выберите команду **Redo**. Когда **Undo** отменит все действия, выполненные в ходе текущего сеанса, она становится недоступной. Если файл сохранить или закрыть, а потом вновь его открыть, команда **Undo** станет недоступна, пока не будут внесены новые изменения. Команда **Redo** противоположна по выполняемой функции команде **Undo**. Если было отменено действие с помощью команды **Undo**, а потом планы изменились, выберите команду **Redo**, чтобы восстановить прежнее состояние. Если с помощью команды **Undo** было отменено несколько действий подряд, то, выбрав команду **Redo** столько же раз, вы повторите эти действия в порядке, противоположном порядку отмены.

Команда **Cut** (Вырезать), комбинация клавиш Ctrl+X или Shift+Del, удаляет выделенный фрагмент из области редактирования и помещает его в буфер обмена. С помощью программы **Cut** можно удалить и поместить в буфер обмена объект OLE. Используйте команду **Cut** для удаления какого-либо фрагмента из одного места и вставки его в другое место с помощью команды **Paste**. Команда **Copy** (Копировать), комбинация клавиш Ctrl+C или Ctrl+Ins, копирует выделенный фрагмент (не удаляя его), помещая его в буфер обмена. Команда **Paste** (Вставить), комбинация клавиш Ctrl+V или Shift+Ins, вставляет копию содержимого буфера обмена в текущий файл или в поле позиции курсора. При этом невозможно редактировать изображения, созданные другими программами.

Команда **Clear** (Очистить) удаляет выделенный фрагмент, не помещая его в буфер обмена. Если данная команда выбрана при наличии выделения, она действует точно так же, как клавиши Delete или Backspace.

Работа с библиотеками

С помощью команды **Find in Library** (Найти в библиотеке), комбинация клавиш Ctrl +H, можно осуществить поиск в открытом файле библиотеки. Пока файл библиотеки не открыт, эта команда недоступна. Необходимо открыть файл библиотеки (стандартной поставляемой в пакете программ ChemWindow или созданной пользователем), а затем выбрать в меню **Edit** команду **Find in Library**. В поле **Find records where the title** (Найдите записи, где название) можно указать **Contains** (Содержится), **Starts with** (Начинает с), **Ends with** (Заканчивается), а в следующем поле набрать название соединения или часть названия.

Если в независимом переключателе **Ignore case** установлен значок ✓, то при поиске не будет учитываться регистр набранного слова. Если необходимо начать поиск, вы должны нажать кнопку **Find First** (Найти первое). В этом случае в файле библиотеки черной рамкой будет обозначена та

структура, которая отвечает критериям поиска. Если вы хотите найти все названия, удовлетворяющие критериям поиска, то нажмите **Find All** (Найти все). Для отказа от поиска нажмите **Cancel**. Следует отметить одно очень важное ограничение программы ChemWindow – при поиске *русский язык не поддерживается!*

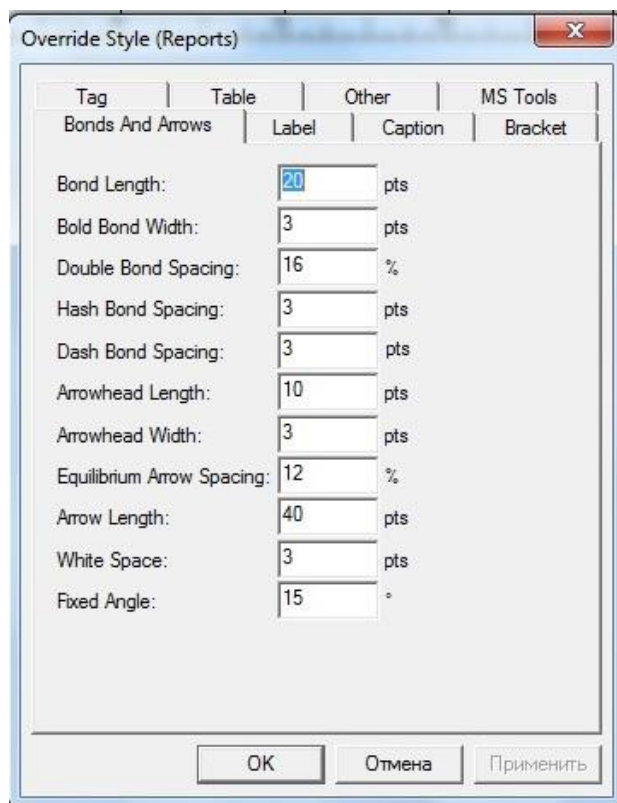
После того, как ChemWindow найдет символьную последовательность, заданную в диалоге **Find in Library**, можно, выбрав команду **Find Next in Library** (Найти в библиотеке следующее), комбинация клавиш Ctrl+Q, найти следующее вхождение этой последовательности. Когда ChemWindow найдет последнее вхождение, то звуковой сигнал сообщит об этом и больше перемещений на новую структуру не произойдет. Команда **Find Next in Library** будет доступна только после того, как будет выполнена команда **Find in Library**. По команде **Select All** (Выделить все), комбинация клавиш Ctrl+A, происходит выделение содержимого окна редактирования. По команде **Join** (Присоединить), комбинация клавиш Ctrl+J, происходит перемещение выбранных структур в положение максимального прилегания ближайших друг к другу узловых точек. Данная команда корректно объединяет циклы, связи. Объединение возможно только для объектов, которые имеют узловые точки связывания (циклов, связей, стрелок). Имейте в виду, что объекты, созданные с помощью шаблонов орбиталей, кривые Безье, текст, набранный с помощью инструмента **Text**, не имеют узловых точек для связывания.

Изменение установок текущего стиля(Override Style)

По команде **Override Style** (Определить стиль) можно изменить установки текущего стиля. В последующем эти изменения можно использовать только для текущего сеанса работы, сохранить их для дальнейшей работы или создать новый стиль.

В диалоге **Override Style** представлены шесть вкладок, в которых представлены все основные характеристики стиля, доступные пользователю для изменения.

Дадим краткую характеристику каждой вкладки.



Вкладка **Bonds And Arrows** (Связи и стрелки) устанавливает основные параметры связей и стрелок:

Bond Length – длина связи;

Bold Bond Width - толщина «жирной» связи;

Double Bond Spacing - расстояние между связями в двойной связи;

Hash Bond Spacing - шаг в штриховой связи;

Dash Bond Spacing - шаг в пунктирной связи;

Arrowhead Length - длина острия стрелок;

Arrowhead Width - ширина острия стрелок;

Equilibrium Arrow Spacing - расстояние между стрелками в стрелках равновесия;

Arrow Length – длина стрелки;

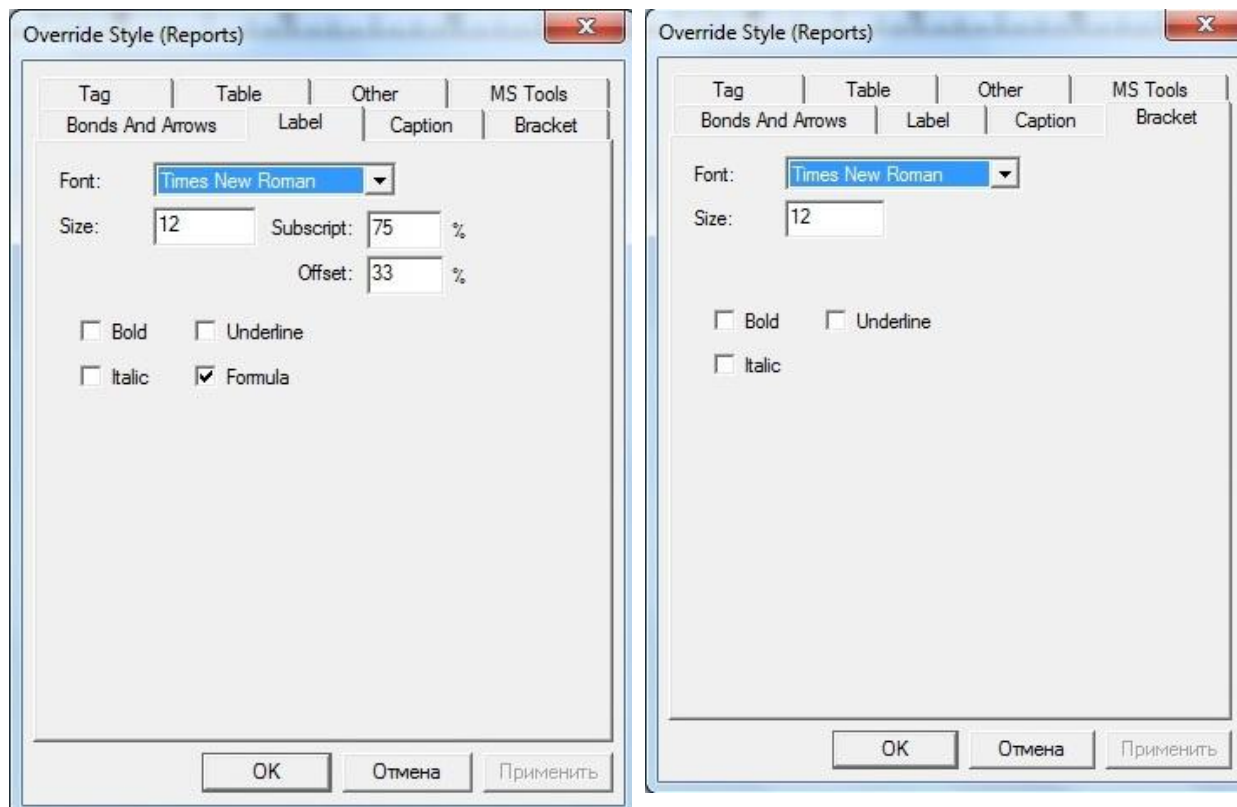
White Space – интервал;

Fixed Angle - фиксированный угол, на который осуществляется поворот объектов при их рисовании.

Вкладка **Label** (Этикетка) устанавливает шрифтовое оформление текста формул, который набирается инструментом.

Вкладка **Caption** (Заголовок) устанавливает шрифтовое оформление текста, который не имеет химического значения, в отличие от текста, набранного **Label**. Этот текст набирается инструментом **Text**.

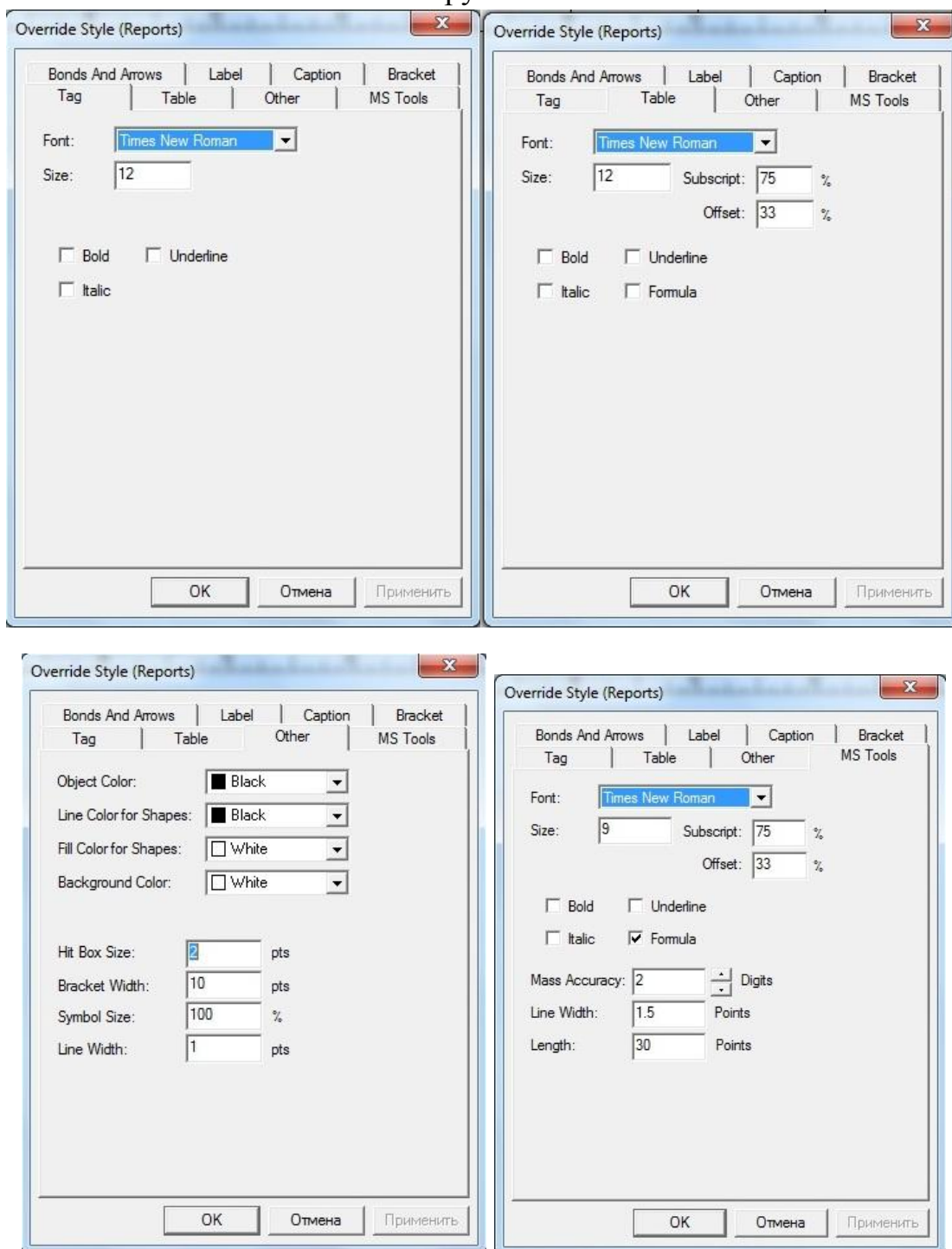
Вкладка **Bracket** (Скобки) устанавливает шрифтовое оформление текста в нижних и верхних индексах «скобок», которые набирается инструментом **Text**.



Вкладка **Tag** (Подпись) устанавливает шрифтовое оформление текста в метках атомов в набираемых химических структурах.

Вкладка **Table** (Таблица) устанавливает шрифтовое оформление текста в таблицах, создаваемых инструментом **Text**.

Все вышеперечисленные вкладки имеют примерно одинаковый набор шрифтового оформления, который можно изменить. Необходимо, чтобы был установлен шрифт, который имеет набор символов русского алфавита, если вы хотите чтобы текст был на русском языке.



Size – размер шрифта в пунктах (1 пункт = 1/72 дюйма $\equiv$ 0.353 мм).

Цифровое значение размера в пунктах называется кеглем.

Subscript – размер шрифта в % от первоначально установленного в поле Size, для верхних и нижних индексов.

Offset – смещение верхнего и нижнего индексов относительно базовой линии в %.

Bold – полужирный стиль начертания символов.

Italic – курсив, наклонный стиль начертания символов.

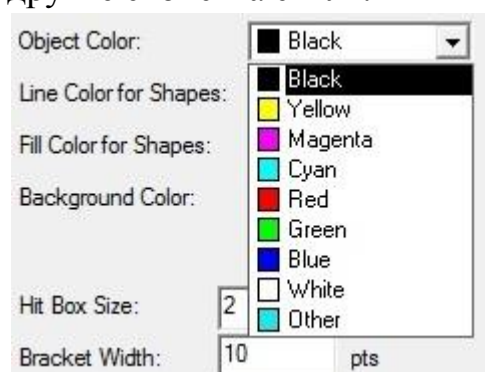
Underline – подчеркнутый стиль начертания символов.

Formula – стиль формулы. Автоматически переводит символы в верхний или нижний индексы. Знаки плюс (+) и дефис (-) поднимаются со следующими за ними цифрами в верхний индекс. Все остальные цифры опускаются в нижний индекс. По умолчанию данный стиль включен для набора атомов, т.е. при редактировании.

Вкладка **Other** (Другое) устанавливает другие свойства стиля.

Object Color определяет цвет объекта. Нажимая на элемент поля ввода со списком, вы получите возможность выбора любого другого цвета, отличного от приведенных по умолчанию.

Line Color for Shapes – цвет линии форм, создаваемых инструментом.



Fill Color for Shapes – цвет заливки для форм, создаваемых инструментом.

Background Color – цвет фона.

Hit Box Size – размер «квадратика», который появляется при наведении курсора на атом или связь, pts (ниже стрелкой показан этот «квадратик»).

Symbol Size – размер символов (в %), которые набираются инструментами панели **Symbol Tools**:



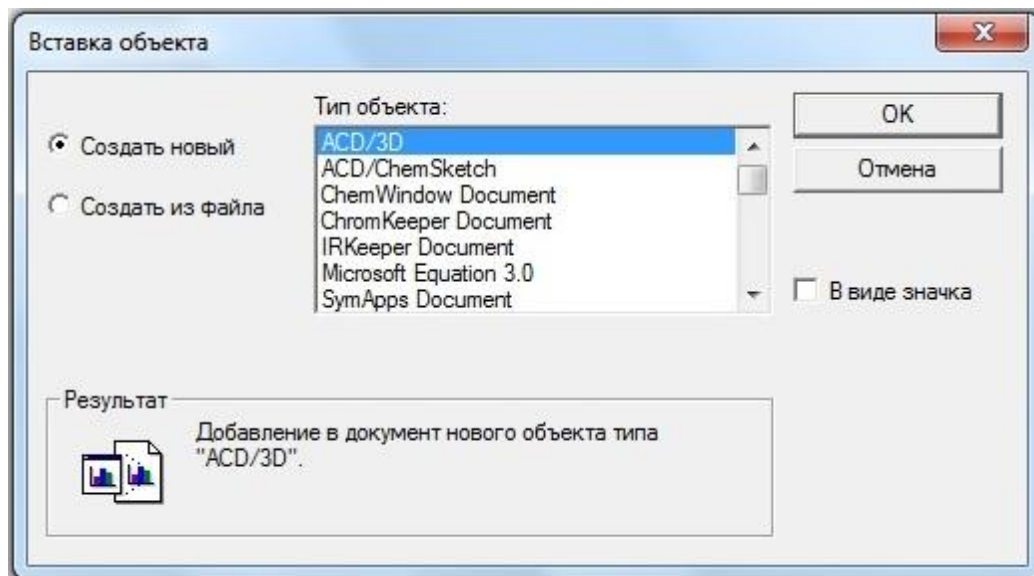
Изменение шрифтового оформления **Font**, **Size**, **Subscript**, **Offset**, **Bold**, **Italic**, **Underline**, **Formula** осуществляется аналогично ранее рассмотренным вкладкам.

Mass Accuracy (Точность измерения массы) устанавливает количество цифр после запятой, для молекулярной массы фрагментов, полученных при использовании инструмента **MS Fragmentation**. По умолчанию – 2.

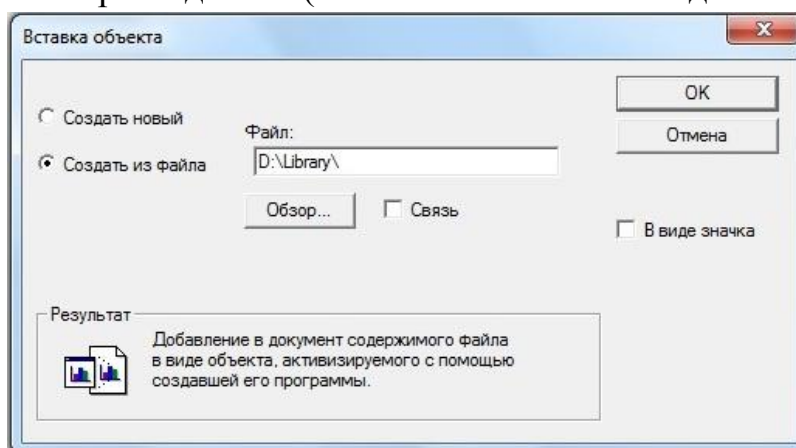
LineWidth – толщина линий комментариев (в пунктах, *pts*).

Length – длина линий комментариев (в пунктах, *pts*).

Чтобы внедрить в активный документ объект, которого нет в буфере обмена или который еще не создан, можно воспользоваться командой **Insert New Object**. Когда выбирается команда **Insert New Object**, появляется диалог **Вставка объекта**:

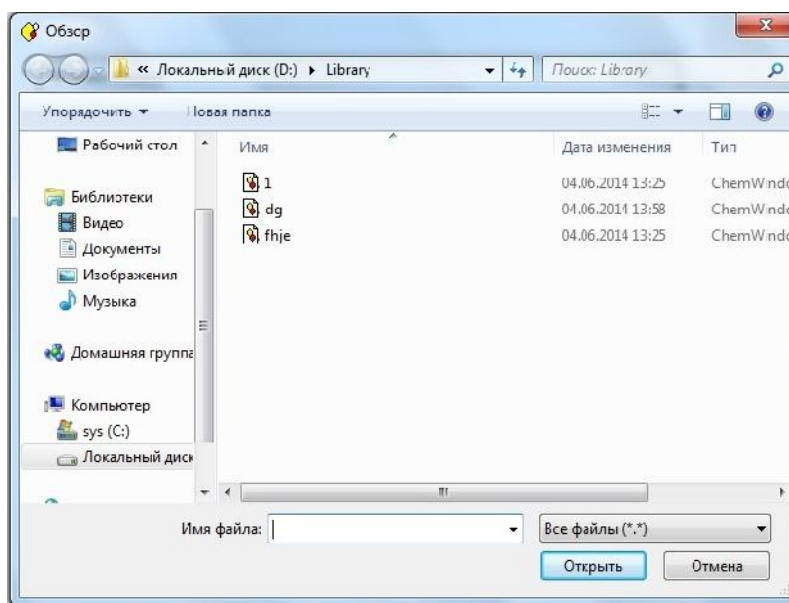


Теперь можно выбрать тип объекта и одновременно его внедрить в активный документ. В списке **Тип объекта** приводятся имеющиеся на вашем компьютере приложения, выступающие в роли OLE-серверов. Если вы хотите создать и внедрить новый объект, выберите из данного списка тип объекта (например, **Adobe Acrobat Document**). Нажмите кнопку **OK**, чтобы открыть выбранное приложение. Создав и обновив объект, выйдите из приложения; ChemWindow автоматически внедрит объект в поле. Если вы уже создали и сохранили объект ранее в файле, нажмите кнопку **(Создать из файла)**, чтобы открыть диалог **(Вставка объекта - Создать из файла)**.

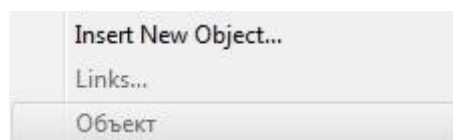


Нажав кнопку **Обзор** в открывшемся диалоге **Обзор**, можно в поле **(Имя файла)** ввести имя объекта (имя файла) или, используя кнопки перемещения по дискам и папкам, найти нужный файл, выбрать его с помощью мыши и нажать кнопку **Открыть**.

При этом диалог **Обзор** будет закрыт и останется диалог **Вставка** объекта. Вы должны нажать кнопку ОК, чтобы внедрить выбранный объект, или **Cancel**, чтобы выйти из диалога, не внедряя файл. Вы можете отметить поле (**В виде значка**), тогда в документ будет вставлен значок, обозначающий объект данного типа и имя вставленного файла. Если активируете **Связь**, то в этом случае будет вставлена только ссылка на соответствующий файл, который будет запущен только в случае его активации (двойного нажатия на иконке мышкой).



После применения команды **Insert New Object**, в меню **Edit** появляется новая команда **Объект**. Эта команда будет активна тогда, когда данный объект выделен.



Можно либо активировать внедренный объект, либо провести его редактирование в соответствующем приложении.

Links – просматривает или обновляет связь объекта. Данная команда отображает диалог, в котором можно редактировать связь исходного приложения с объектом OLE в файле. С помощью этой команды можно восстановить разрушенную связь после изменения имени или местоположения связанного файла.

Объект – активизирует или изменяет объект OLE.

Работа с командами-переключателями

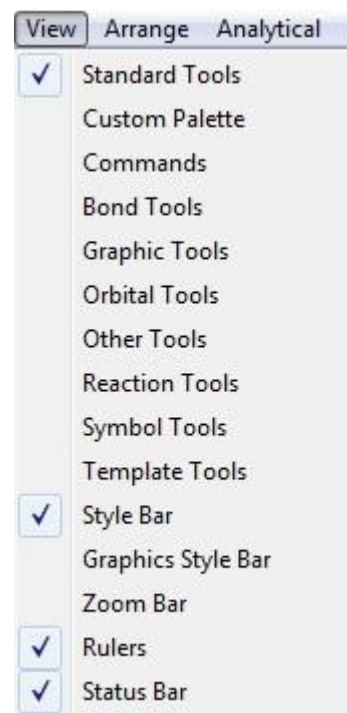
Меню **View** (Вид) содержит команды, которые используются для настройки панелей инструментов и рабочего окна программы ChemWindow. Это меню содержит только команды-«переключатели», которые только включают или отключают соответствующую панель или команду. Включенная панель помечается ✓. Панели инструментов могут располагаться в

верхней части окна программы рядом со строкой меню (встроенные панели инструментов) или быть в любом месте экрана в виде отдельного окна (плавающие панели инструментов).

3.3. Панели инструментов

Вход в меню осуществляется наведением указателя мыши на слово **View** в строке меню или нажатием комбинации клавиш Alt+V на клавиатуре.

Standard Tools (Стандартная панель инструментов) – панель, содержащая основной набор стандартных инструментов. Ниже приведено назначение каждого инструмента.



 Создать новый документ. Аналог команды меню **File – New Document** (Ctrl-N).

 Инструмент **Selection** (Выделение) – выделение прямоугольных фрагментов.

 Инструмент **Lasso** (Лассо) – выделение произвольных фрагментов.

 Инструмент **Label** (Этикетка) – создание подписи атомов или групп атомов.

 Инструмент **Standard Bond** (Одинарная связь) – создание одинарной связи.

 Инструмент **Cyclohexane** (Циклогексан) – создание циклогексанового кольца (при одновременном нажатии клавиши Alt – бензольное кольцо «Кекуле»).

 Инструмент **Circle Benzene** (Бензол) – рисование бензольного кольца с кольцом внутри (При одновременном нажатии клавиши Alt – бензольное кольцо «Кекуле»).

 Инструмент **Benzene** (Бензол) – создание бензольного кольца.

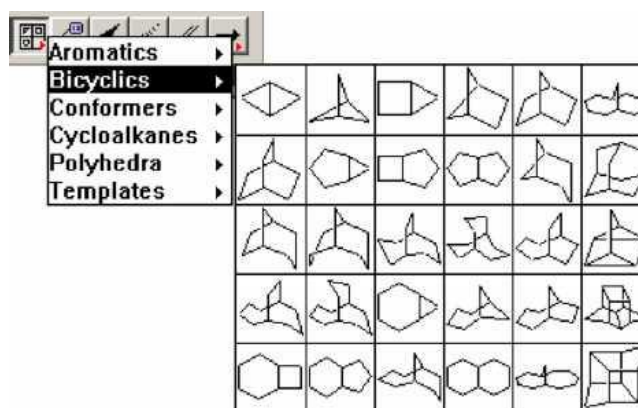
 Инструмент **Cyclopentane** (Циклопентан) – создание циклопентанового кольца (при одновременном нажатии клавиши Alt –

циклопентадиен)



Инструмент **Hierarchical Template** (Иерархический шаблон) – загружает шаблон инструментов из файлов, находящихся в каталоге, который устанавливается в меню **File – Preferences**.

При первом нажатии левой кнопки мыши на этот инструмент происходит загрузка шаблона. При следующем нажатии и удержании левой кнопки мыши появляется меню. В появившемся меню необходимо выбрать соответствующую группу структур, а затем в этой группе выбрать нужную структуру.



Инструмент **Annotation Tool** (Средство комментария) – создание аннотации для выбранного объекта.



Инструмент **Wedge Bond** (Клиновидная связь) – создание клиновидной связи.



Инструмент **Hashed Wedge** (Штриховой клин) – создание штриховой клиновидной связи.

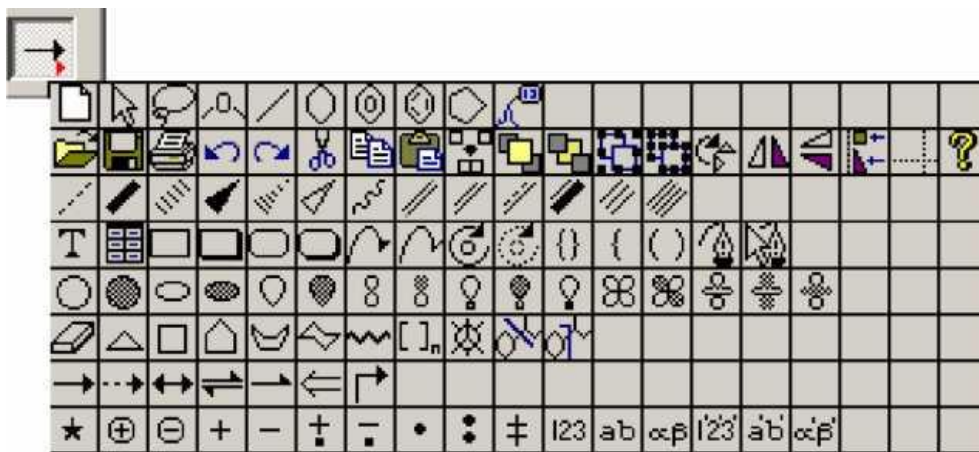


Инструмент **Inside Double Bond** (Двойная связь) – создание двойной связи с более короткой внутренней связью.



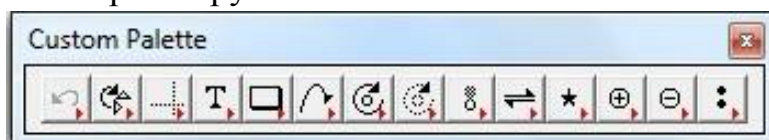
Инструмент **Reaction** (Реакция) – создание стрелки направления химической реакции.

Последние четыре инструмента – с красным треугольником внизу, означающим, что это настраиваемые инструменты. Нажав на такой инструмент и удержав кнопку более секунды, можно из появившегося меню выбрать любой инструмент и назначить его выбранной кнопке.



Панели инструментов Custom Palette и Commands

Панель инструментов **Custom Palette** (Заказная палитра) содержит настраиваемый набор инструментов.



Панель инструментов **Commands** (Команды) содержит основные команды управления программой **ChemWindow**. Все эти команды доступны через систему меню.



Открыть файл. Аналог команды меню **File – Open** (Ctrl-O).



Сохранить файл. Аналог команды меню **File – Save** (Ctrl-S).



Распечатать активный документ. Аналог команды меню **File – Print** (Ctrl-P).



Отменяет последние выполненные действия. Аналог команды меню **Edit – Undo** (Ctrl+Z или Alt+Back Space).



Повторяет действие, отмененное перед этим с помощью команды **Undo**. Аналог команды меню **Edit – Redo**.



Удаляет выделенный фрагмент и помещает его в буфер обмена. Аналог команды меню **Edit – Cut** (Ctrl+X или Shift+Del).



Копирует выделенный фрагмент и помещает его в буфер обмена. Аналог команды меню **Edit – Copy** (Ctrl+C или Ctrl+Ins).



Помещает содержимое буфера обмена туда, где находится курсор. Аналог команды меню **Edit – Paste** (Ctrl+V или Shift+Ins).



Присоединяет выбранные объекты через узловые точки. Аналог команды меню **Edit – Join** (Ctrl+J).



Перенести на передний план. Аналог команды меню **Arrange – Bring to Front**.



Перенести на задний план. Аналог команды меню **Arrange – Send to Back**.



Сгруппировать. Аналог команды меню **Arrange – Group** (Ctrl-G).



Разгруппировать. Аналог команды меню **Arrange – Ungroup** (Ctrl-U).



Включает режим свободного вращения. Аналог команды меню **Arrange – Freerate**.



Отразить по горизонтали. Аналог команды меню **Arrange – Flip Horizontal**.



Отразить по вертикали. Аналог команды меню **Arrange – Flip Vertical**.



Упорядочить объекты. Аналог команды меню **Arrange – Align Objects**.



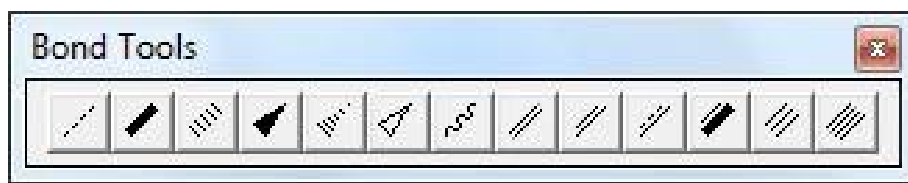
Включает перекрестие. Аналог команды меню **Arrange – Crosshair**.



Помощь. Аналог команды меню **Help – Help Topics**.

Панель инструментов Bond Tools

Панель инструментов **Bond Tools** содержит основные команды для работы с различными типами химических связей.



Dash Bond – пунктирная связь.



Bold Bond – утолщенная связь.



Hash Bond – штриховая связь.



Wedge Bond – стереохимическая сплошная связь.



Hashed Wedge – стереохимическая штриховая связь.



White Wedge Bond – стереохимическая полая связь.



Undefined Bond – волнистая связь.

Double Bond – двойная связь.

Inside Double Bond – двойная связь с укороченной линией.

Dashed Double Bond – двойная связь с пунктирной линией.

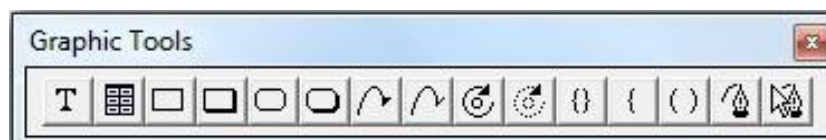
Inside Bold Double Bond – двойная связь с утолщенной линией.

Triple Bond – тройная связь.

Quadruple Bond – четверная связь.

*Панель инструментов **Graphic Tools***

Панель инструментов **Graphic Tools** (графические инструменты) содержит команды для работы с графическими объектами.



Инструмент **Caption Tool** – для создания подписей и заголовков к схемам и химическим структурам.



Инструмент **Table Tool** служит для создания таблицы. В случае использования инструмента с одновременным нажатием клавиши **Shift** можно изменять ширину ячеек.



Инструмент **Rectangle Tool** предназначен для создания прямоугольников. В случае использования инструмента с одновременным нажатием клавиши **Shift** рисуется квадрат.



Инструмент **Shadow Rectangle Tool** предназначен для создания прямоугольников с тенью. В случае использования инструмента с одновременным нажатием клавиши **Shift** рисуется квадрат с тенью.



Инструмент **Rounded Rectangle Tool** предназначен для создания прямоугольников со скошенными углами. В случае использования инструмента с одновременным нажатием клавиши **Shift** рисуется квадрат со скошенными углами.



Инструмент **Shadow Rounded Rectangle Tool** предназначен для создания прямоугольников со скошенными углами и тенью. В случае использования инструмента с одновременным нажатием клавиши **Shift** рисуется квадрат со скошенными углами и тенью.



Mechanistic Arrow Tool. Кривая без/со сплошной стрелкой.



Electron Arrow Tool. Кривая без/ с острой стрелкой.



Circle, Arc, Oval Tool. Рисование окружностей. При повторном использовании инструмента внутри нарисованной окружности позволяет нарисовать дугу со стрелкой или без. В случае использования инструмента с одновременным нажатием клавиши **Shift** рисуется овал.



Dashed Circle, Arc, Oval Tool. То же самое, что и предыдущий инструмент, но линия – пунктирная.



Double Brace Tool. Парные фигурные скобки.



Single Brace Tool. Одинарная фигурная скобка.



Parentheses Tool. Парные круглые скобки.



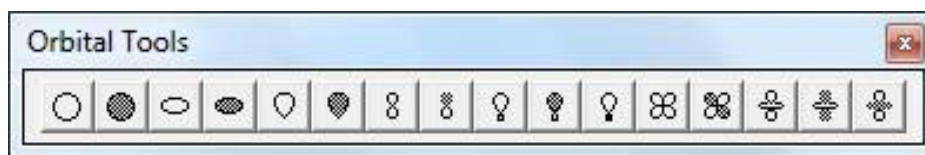
Инструмент **Shape Tool** предназначен для создания произвольных форм.



Инструмент **Shape Editing Tool** предназначен для редактирования форм, созданных инструментом **Shape Tool**.

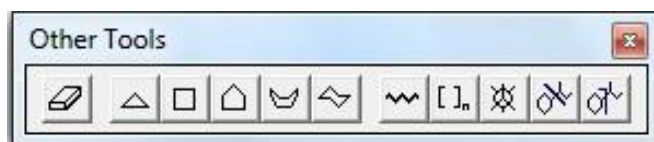
*Панели инструментов **Orbital Tools** и **Other Tools***

Панель инструментов **Orbital Tools** (рисование орбиталей) содержит команды для работы с созданием и редактирования орбиталей.



Все инструменты с данной панели позволяют нарисовать различные типы орбиталей. Все приведенные орбитали или их комбинации позволяют создать практически любой по сложности объект, содержащий орбитали.

Панель инструментов **Other Tools** (Другие инструменты) содержит другие инструменты для работы с объектами.



Eraser позволяет удалять объекты целиком или часть отдельных объектов.



Cyclopropane создает циклопропановое кольцо. При одновременном использовании клавиши **Alt** – циклопропен.



Cyclobutane создает циклобутановое кольцо. При одновременном

использовании клавиши Alt – циклобутadiен.



Cyclopentane создает цикlopентановое кольцо. При одновременном использовании клавиши Alt – цикlopентadiен.



Cyclohexane Boat создает циклогексановое кольцо в конформации «ванна».



Cyclohexane Chair позволяет создать циклогексановое кольцо в конформации «кресло».



Chain (Цепь) позволяет создать цепочку многократно повторяющихся связей, не рисуя их по отдельности.



Bracket создает квадратные скобки с возможностью указания верхних и нижних индексов. Чаще всего этот инструмент применяется для создания сокращенных структур полимеров.



Newman Projection создает проекции Ньюмана.

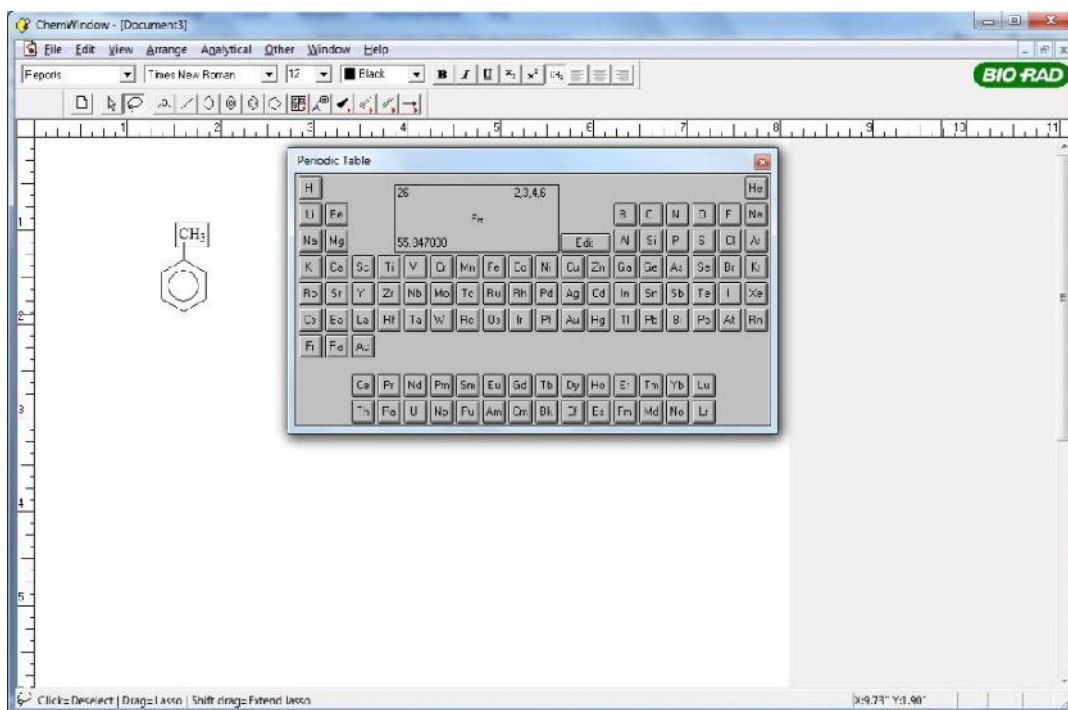
Для того чтобы использовать команду **Formula Calculator**, не обязательно выделять структуру. В поле **Formula** можно самостоятельно набрать любую брутто-формулу и провести аналогичные расчеты:

Periodic Table... – вызывает на экран окно с периодической таблицей Д.И. Менделеева:

Окно обладает такими же свойствами, что и окно **Formula Calculator**, описанное выше. Выбрав указателем мыши определенный элемент (например, железо), в маленьком окошке в центре можно посмотреть его свойства (порядковый номер - 26; возможные валентности - 2, 3, 4, 6; символ - Fe; точную молекулярную массу – 55.847000). Для того чтобы отредактировать свойства выбранного элемента, нужно нажать кнопку **Edit** рядом с информационным окном, или на само информационное окно. Любое из этих действий приведет к появлению окна редактирования **Element Properties** (Свойства элемента).

В данном окне вы можете отредактировать или добавить изотопы данного элемента. В поле **Isotope** указано массовое число изотопа, в поле **Mass** – его точная атомная масса, а в поле **Abundance** – его массовая доля в природе. Все эти данные можно редактировать и добавлять, если есть более точные сведения.

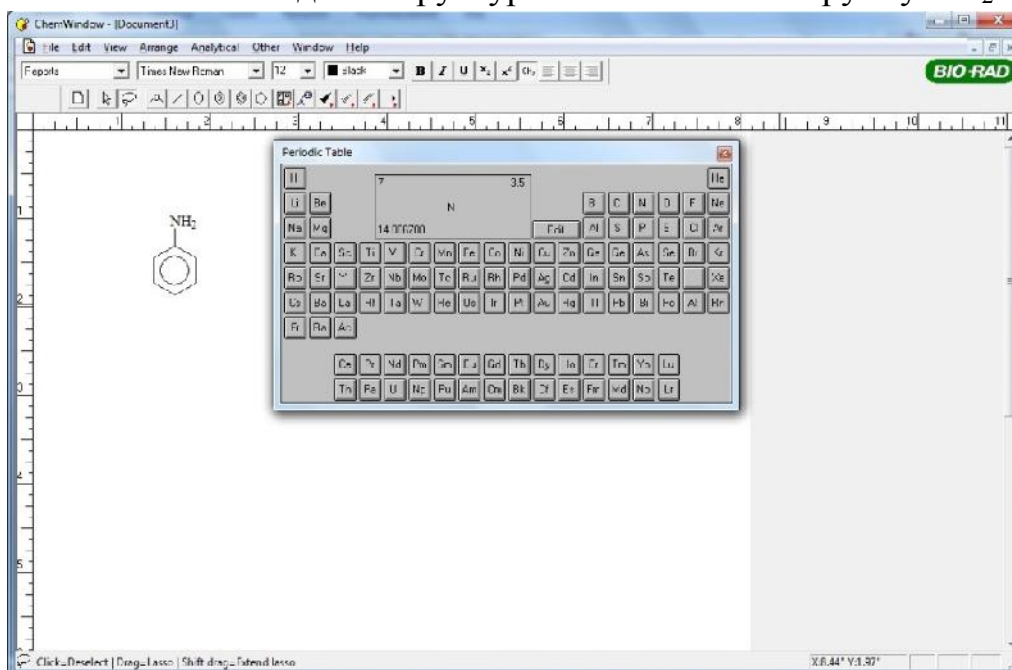
Isotope	Mass	Abundance	Isotope	Mass	Abundance
56	55.934939	91.720000			
54	53.939612	5.800000			
57	56.935396	2.200000			
58	57.933278	0.280000			



Имейте в виду, что неправильно введенные данные могут привести к нежелательным результатам при проведении расчетов с помощью команд **Calculate Mass**, **Formula Calculator**, **MS Fragmentation**, **MS Documenta-**

tion и некоторых других. Поэтому только с помощью окна **Periodic Table** можно изменять элементы в структурах. Для этого атом (или группа атомов) должны быть выделены с помощью инструмента **Lasso** (Лассо). При выборе элемента в окне **Periodic Table** выделенный атом (атомы) в редактируемой структуре будет заменен на этот элемент и автоматически свободные валентности этого элемента дополнены атомами водорода.

В окне **Periodic Table** выбран элемент N, и сразу же после этого выделенный атом в исходной структуре был заменен на группу NH₂.



Обратите внимание, что все символы, обозначающие атомы, должны быть набраны с помощью инструмента **Label**, иначе они не будут восприниматься как обозначения атомов, и при выполнении команды **Check Chemistry** появится сообщение об ошибке.

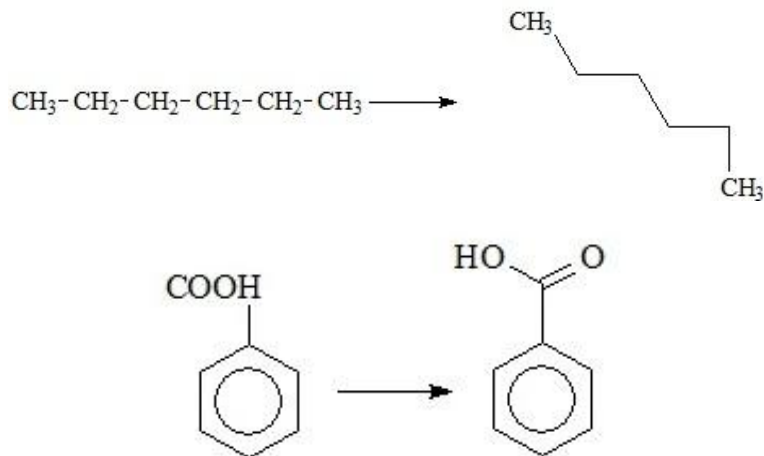
3.4. Изменение структуры молекулы

Make Stick Structure – преобразует сокращенные структурные формулы или сокращения в структурах в развернутую структурную формулу.

При выполнении команды **Make Stick Structure** (Сделать структуру в виде ломаных) происходит преобразование структуры, которая является сокращенной структурной формулой или содержит сокращения функциональных групп в развернутую структурную формулу (в виде ломаных), в которой атомы углерода и водорода не обозначаются, а указываются только гетеро-атомы и атомы водорода в функциональных группах (например, гидроксильная группа –OH).

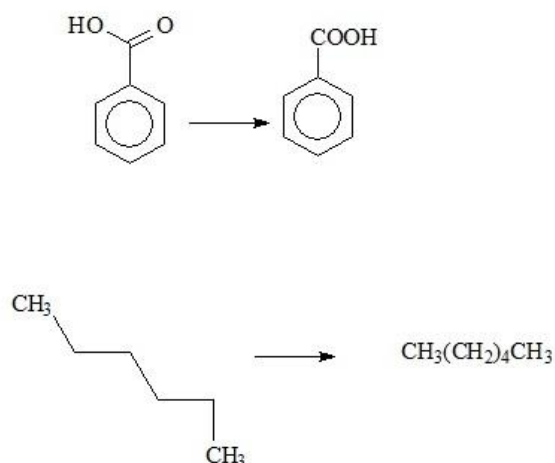
Для того чтобы осуществить преобразование, необходимо выделить эту структуру стандартными средствами и выполнить команду **Make Stick Structure**.

Данная команда выполняется не всегда корректно. И полученная структура не всегда удовлетворяет пользователя. Поэтому не забывайте, что всегда имеется возможность, используя команду **Edit – Undo** (Ctrl-Z), вернуть первоначальную структуру. Примеры выполнения команды **Make Stick Structure**:



Make Labeled Structure – преобразует развернутые структурные формулы в сокращенные и является по своему действию противоположной по действию команде **Make Stick Structure**. При ее выполнении происходит преобразование структуры, которая является развернутой структурной формулой, в структурную формулу, в которой функциональные группы будут приведены в виде принятых сокращений. Для того чтобы осуществить преобразование, необходимо выделить эту структуру стандартными средствами и выполнить команду **Make Labeled Structure**. Например, на рисунке приведены несколько примеров использования команды **Make Labeled Structure**.

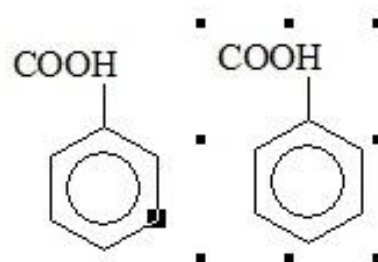
Команда **Make Labeled Structure**, как и ранее рассмотренная команда **Make Stick Structure**, выполняется не всегда корректно. Поэтому не забывайте, что всегда имеется возможность, используя команду **Edit – Undo** (Ctrl-Z), вернуть первоначальную структуру.



Add User Chemistry добавляет нестандартные сокращения групп атомов (пользовательскую структуру). Например, известны сокращения групп: -CH₃ - Me; CH₃COO — Ac; C₆H₅— Ph и т.д. Вы можете самостоя-

тельно создать такую структуру и использовать сокращение в дальнейшей работе, например, для остатка хлоруксусной кислоты.

Если вы хотите выделить нетекстовый объект, то нужно совместить указатель мыши с узловой точкой и нажать левую кнопку мыши. Объект будет выделен. Если при использовании этого способа необходимо выделить несколько объектов, то при выделении каждого дополнительного объекта нужно удерживать клавишу **Shift**.



После того как объект выделен, с ним можно проводить различные операции редактирования, выравнивания и взаимного расположения объектов. С помощью мыши (нажав левую кнопку мыши и не отпуская ее) можно отбуксировать («перетащить») выделенный объект (или объекты) в новое место. Если при этом нажата клавиша **Ctrl**, то вместо перемещения объекта происходит создание его копии. Можно изменить масштаб выделенных объектов, нажав левую кнопку мыши на соответствующих маркерах, ограничивающих выделенный объект, и, не отпуская ее, переместить в нужное место. Если указатель мыши переместить на угловой маркер, то масштаб изображения изменится пропорционально, а если на промежуточные маркеры, то - не пропорционально.

Инструмент **Caption** предназначен для набора текста, который не будет содержать связей с атомами и не имеет химического смысла, т.е. для набора подписей к структурам, создания заголовков, различного текста, который носит информационный характер. Параметры инструмента **Caption** (шрифтовое оформление, начертание, размер шрифта и т.д.) определяются в установках стилей.

Например, нам нужно подписать ранее подготовленную формулу валериановой кислоты. Активируем инструмент **Caption**. Перемещаем в нужное место указатель мыши и щелкаем левой кнопкой мыши. В этом месте начинает мигать курсор. На клавиатуре набираем «валериановая кислота». В результате получаем структурную формулу с подписью.

Если после активации инструмента **Caption** нажать левую кнопку мыши и, не отпуская ее, переместить указатель мыши в сторону, то будет создана рамка, внутри которой будет мигать курсор. В результате можно будет создать надпись в рамке.

При наборе текста в рамке она не обладает свойством автоматически увеличивать или уменьшать свой размер в зависимости от количества введенного текста. Если рамка значительно больше набранного текста, то останется свободное место, если меньше – то часть текста не будет видна. Для

увеличения и уменьшения размера рамки используйте инструмент **Selection**.

С помощью инструмента **Caption** можно применять все описанные ранее функции работы с текстом: изменение начертания шрифта, размер шрифта, надстрочные и подстрочные символы; выравнивание текста по левому, по правому краю и по центру; изменение кернинга символов и т.д. Все эти возможности активируются на панели **Style Bar**.

Так же, как и при работе с инструментом **Label**, можно набирать текст в несколько строк, использовать клавиши Ctrl+стрелка влево и Ctrl+стрелка вправо для изменения кернинга символов.

При создании подписей к структурам часто возникает необходимость использования символов греческого алфавита в тексте. Отдельной функции для написания таких символов при наборе текста в программе ChemWindow не предусмотрено. Поэтому, чтобы решить эту задачу, можно рекомендовать следующий прием.

Например, в подписи к структуре нам нужно написать «3b,6b- эпидиокси-5a-андростан». Для этого нужно активировать инструмент **Caption**, переместить указатель мыши в нужное место рабочего поля программы ChemWindow и щелкнуть левой кнопкой мыши, чтобы войти в режим редактирования. Затем нужно на панели инструментов **Style Bar** войти в раздел **Font** и выбрать шрифт **Symbol**. В этом шрифте размещены символы греческого алфавита. Набор символов греческого алфавита следует осуществлять в английской раскладке клавиатуры. Последовательно нажимаем клавиши «3», «b», «,», «ПРОБЕЛ», «6», «b». В результате должно получиться «3b, 6b». Затем нужно вернуть исходный шрифт, выбрав его в разделе **Font** на панели инструментов **Style Bar**, например, **Times New Roman Cyr**, и продолжить набор текста в обычном режиме, не забыв переключиться на русскую раскладку клавиатуры. Когда понадобится набрать символ «а», нужно повторить вышеописанное: на панели инструментов **Style Bar** войти в раздел **Font** и выбрать шрифт **Symbol**; переключиться на английскую раскладку клавиатуры; нажать клавишу «а» и т.д.

Основная проблема при использовании шрифта **Symbol** – это необходимость знания, какой клавише в английской раскладке клавиатуры соответствует символ греческого алфавита.

Часто возникает необходимость использования некоторых специальных символов, которых нет на клавиатуре. Их набор можно осуществить следующим способом. Нажать клавишу Alt и, не отпуская ее, набрать на цифровой (правой) клавиатуре код требуемого символа. NumLock при этом должен быть включен.

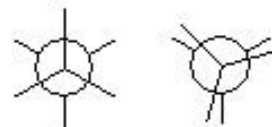
Текст, подготовленный с помощью инструмента **Caption**, должен

редактироваться только инструментом **Caption**, а текст, созданный с помощью инструмента **Label**, должен изменяться инструментом **Label**. В противном случае вы не сможете изменить текст.

Работа с проекционными формулами Ньюмана

Для создания проекционных формул Ньюмана используют инструмент **Newman Projection** из панели инструментов **Other Tools**. Для создания проекций необходимо активировать инструмент **Newman Projection** любым удобным способом. Переместить указатель мыши в нужное место рабочего поля, нажать левую кнопку мыши. При этом появится проекция Ньюмана и, пока вы держите левую кнопку мыши, можно вращать центральную часть проекции. Как только вы отпустите кнопку мыши, проекция примет окончательный вид. Для добавления функциональных групп можно использовать ранее описанные инструменты **Lasso** или **Label**.

Вращение осуществляется на угол, кратный 15° . Если при вращении нажать клавишу **Ctrl** и удерживать ее, то вращение осуществляется на угол кратный 1° . Пример использования инструмента **Newman Projection** с заторможенной и заслоненной конформациями:



Инструмент **Bracket** размещается на панели инструментов **Other Tools** и предназначен для создания квадратных скобок. Часто этот инструмент используется для рисования структур полимеров. Например, на следующем рисунке приведена структура полиорганосилоксана, в изображении которой использованы квадратные скобки. После того, как описанными ранее способами строим структуру остова полимера, активируем инструмент **Bracket**, перемещаем указатель мыши в нужное место, нажимаем левую кнопку мыши и, удерживая ее, перемещаем указатель мыши, пока рамка не станет необходимого размера. После этого отпускаем кнопку мыши. В углах рамок появятся пунктирные прямоугольники, обозначающие местоположение коэффициентов. Щелкая в нужное место, можно набрать необходимый коэффициент. Если в дальнейшем нужно будет отредактировать эти коэффициенты, то следует вновь активировать инструмент **Bracket** и, щелкнув в нужном месте, отредактировать коэффициент.

Основные символы, доступные для пользователя, размещены на панели инструментов **Symbol Tools** (Символы). Все символы на этих панелях условно можно разделить на две группы: символы, обозначающие свойства атома (заряды, радикалы, пары электронов и т.д.), и символы нумерации.

Рассмотрим использование данных инструментов. Например, необходимо создать *трет*-бутил-катион. Для этого описанными ранее способами мы рисуем структуру. Затем активируем удобным способом, например, ин-

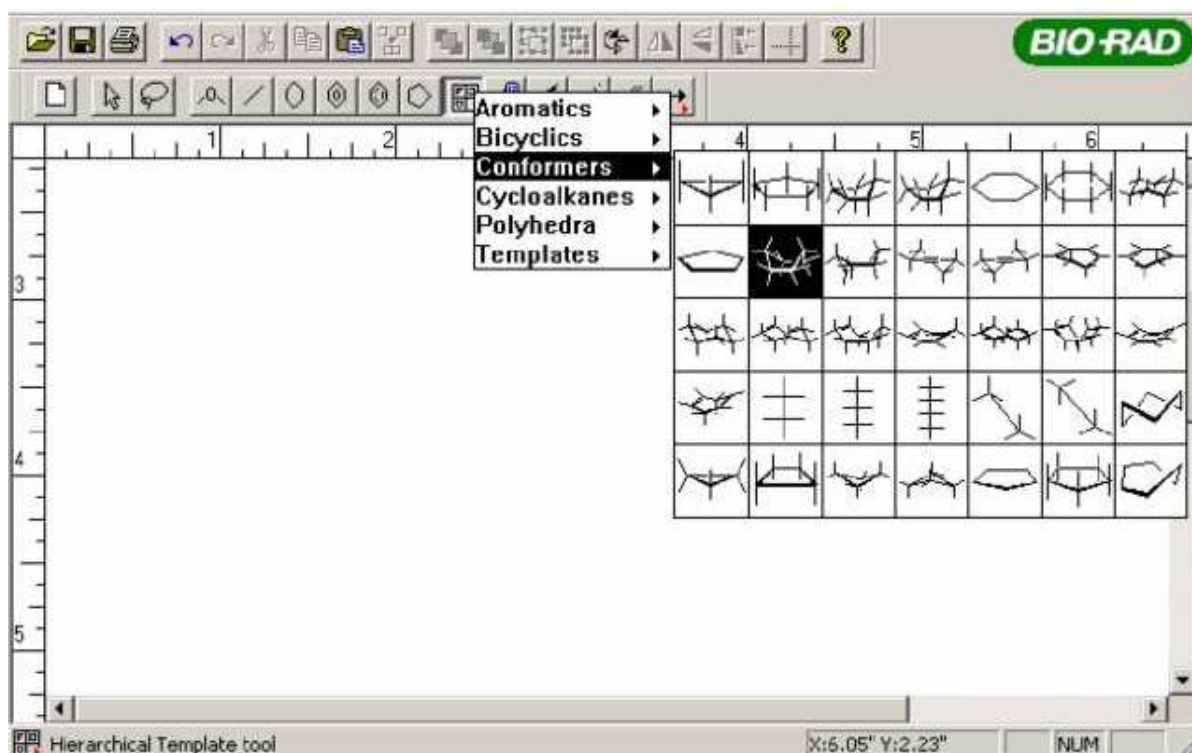
струментом **Positive Charge**. Наводим указатель мыши на атом углерода, у которого должен стоять заряд. Этот атом должен быть помечен черным маркером. После щелкаем левой кнопкой мыши. Заряд примет нужное положение, которое программа выберет автоматически. Можно поступить по-другому. После того, как вы навели указатель мыши на выбранный атом, нужно нажать левую кнопку мыши и не отпускать ее, пока перемещением мыши не добьемся нужного положения заряда. Только после этого можно отпустить кнопку мыши. Заряд займет нужное положение. Обратите внимание, что перемещение заряда осуществляется на угол, кратный 45° .

При написании химических реакций, создании структур различных химических соединений значительно облегчить работу может использование шаблонов (**Template**) - заранее подготовленных структур, объектов и т.д. Для использования шаблонов в программе ChemWindow предусмотрено несколько возможностей.

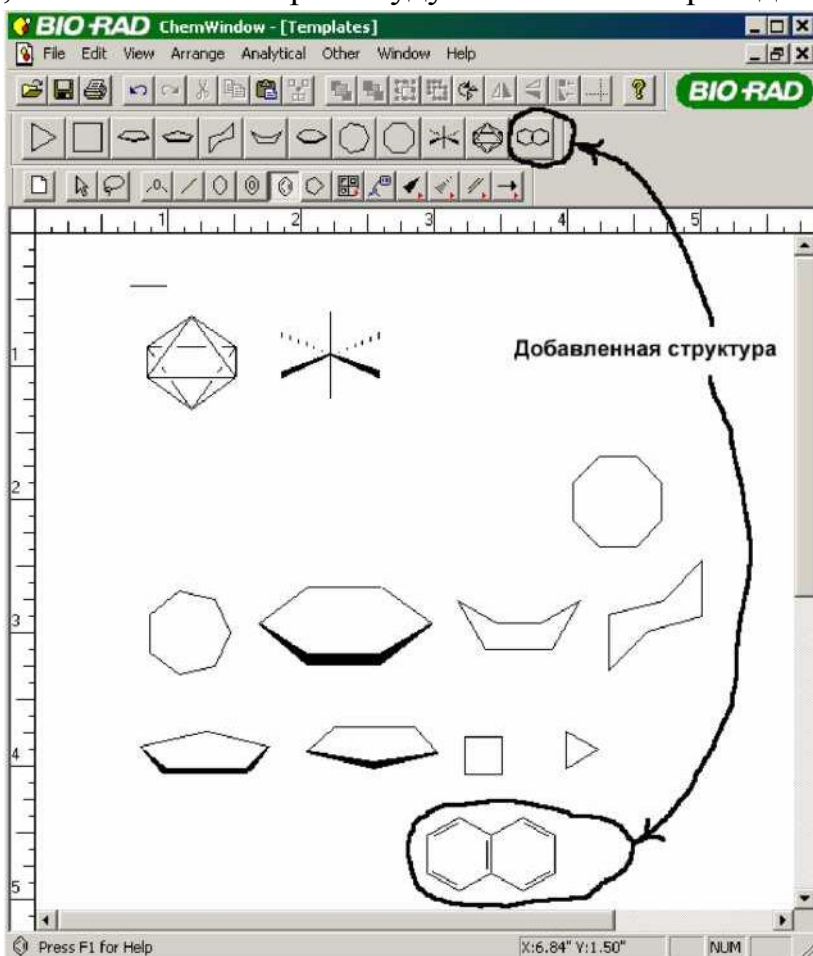
В программе ChemWindow имеется стандартная панель инструментов **Template Tools**, на которой представлены некоторые наиболее часто используемые инструменты. Количество и ассортимент этих инструментов определяются содержанием файла *templates.cwt*, доступ к которому указывается в меню **File – Preferences**. Этот файл можно модифицировать или вообще указать другой файл. Для того чтобы сделать какие-то изменения в этом файле, нужно его открыть, используя команду **File – Open**. Размещение файла *templates.cwt* указано в меню **File – Preferences**, но обычно это «*C:\Program Files\Bio-Rad Laboratories\ChemWin\Templates*». В открывшемся файле вы увидите структуры, которые показаны на панели инструментов **Template Tools**. Можно изменить их, добавить новые, удалить ненужные и т.д. Поместить новую структуру можно в любом месте экрана. Программа автоматически определит ее, как только вы сохраните файл. Например, на рисунке показано окно программы ChemWindow с открытым файлом *templates.cwt*. В этот файл была добавлена структура нафталина, и после его сохранения она появилась на панели инструментов **Template Tools**.

На панели инструментов **Standard Tools** находится инструмент **Hierarchical Template**, который активирует набор стандартных шаблонов.

При первом нажатии на эту кнопку происходит загрузка стандартных структур из файлов, которые находятся в папке, путь к которой указан в **File – Preferences**. В этой папке находится набор файлов, поставляемый производителями программы ChemWindow: *Aromatics.cwt*, *Bicyclics.cwt*, *Conformers.cwt*, *Cycloalkanes.cwt*, *Polyhedra.cwt* и *Templates.cwt*. После того, как файлы шаблонов загружены, структуры, которые в них представлены, можно использовать.



Для этого нужно навести указатель мыши на инструмент **Hierarchical Template**, нажать левую кнопку мыши и удерживать ее. Появится иерархическое меню, элементами которого будут имена вышеприведенных файлов.

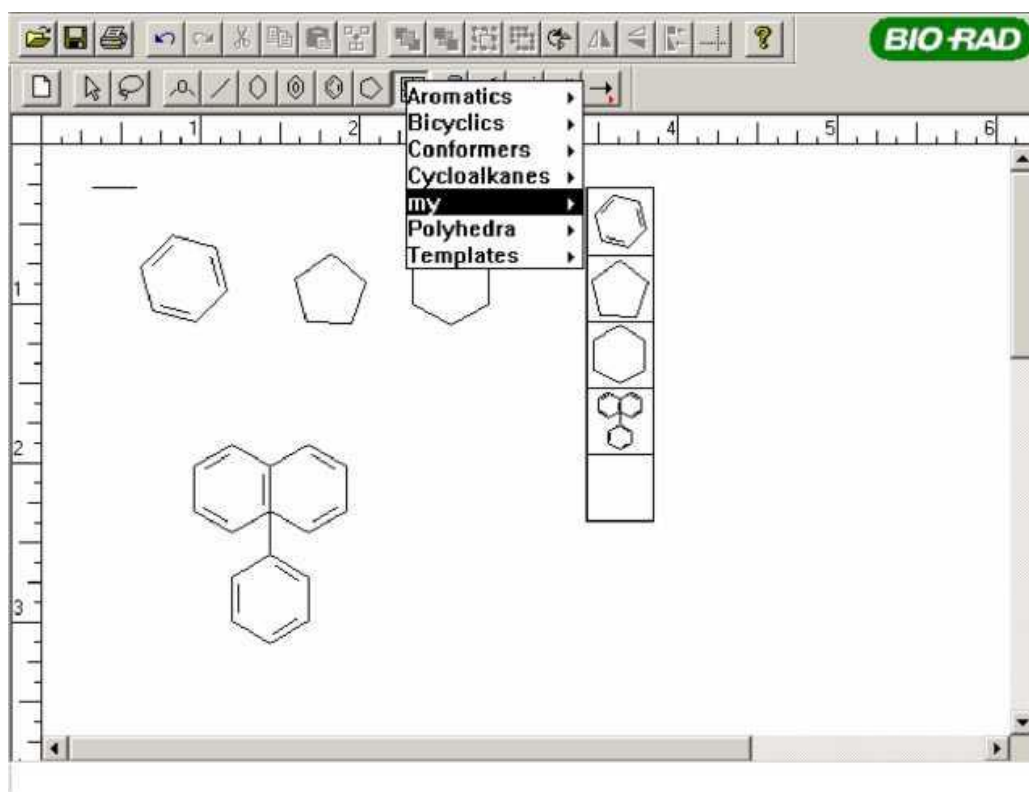


Передвигаясь по нему, можно выбрать нужную структуру. Как только

вы выбрали необходимую структуру, нужно отпустить левую кнопку мыши – меню исчезнет. Переместить указатель мыши в нужное место рабочего поля программы ChemWindow и щелкнуть левой кнопкой мыши. Появится желаемая структура. Если нажать левую кнопку мыши и, не отпуская ее, переместить указатель мыши в нужном направлении, то можно повернуть структуру так, чтобы она заняла нужное положение. Так же, как и в случае, описанном для файла *templates.cwt*, любой из файлов, входящих в структуру иерархического меню, можно редактировать, дополнять нужными структурами, которых нет в стандартной поставке.

Обратите внимание, что элемент меню **Templates** такой же, как и состав панели инструментов **Template Tools**. Это связано с тем, что файл *Templates.cwt* находится в той же папке, что и остальные файлы шаблонов.

Можно создать свой собственный шаблон, который будет содержать необходимые объекты для конкретной работы. Для этого, используя команду **File – New Document**, создайте новый документ. В данном документе нарисуйте те структуры, которые должны содержаться в вашем шаблоне в любом порядке. При необходимости сгруппируйте отдельные элементы, чтобы они являлись самостоятельным элементом шаблона.



Сохраните созданный файл, используя команду **File – Save As**. Для этого в поле **Имя файла** укажите имя вновь созданного файла, в поле **Тип файлов** выбрать «Styles and Templates (*.cwt)». Свой файл нужно сохранить в той папке, где лежат файлы шаблонов. Эта папка определяется установками в **File – Preferences**. Как только файл будет сохранен, он сразу же появится в иерархическом меню. На рисунке приведен пример файла шаблона

tu.cwl и соответствующее иерархическое меню. При создании файла шаблонов рекомендуется обязательно включить в него простую связь в виде отдельного объекта. Она необходима в качестве эталона связи для правильного масштабирования сложных структур. В меню она не отображается.

Использование библиотек

В программе ChemWindow предусмотрена возможность работы с библиотеками различных графических объектов. Ими могут быть структуры химических соединений и другие графические объекты. Это своеобразные мини-базы данных, которые снабжены элементарными возможностями поиска. В стандартной поставке ChemWindow есть несколько библиотек. Они находятся в папке, указанной в **File – Preferences** (обычно это – «C:\ProgramFiles\Bio-RadLaboratories\ChemWin\Libraries\»). Имена файлов и их описание представлены ниже:

CESymbol.cwl – в состав файла входят графические объекты, предназначенные для построения технологических схем химического производства (97 записей).

LabGlass.cwl – содержит графические объекты разнообразной химической посуды. С их помощью можно собирать различные по сложности химические установки (139 записей).

OtherLib.cwl – формулы органических соединений (1188 записей).

StrucLib.cwl – формулы органических соединений (2791 запись).

Для того чтобы работать с какой-то библиотекой, ее необходимо открыть, используя команду **File – Open**. При этом появляется окно с графическими объектами в виде небольших иконок и подстрочного описания к ним. Обратите внимание, что из строки меню исчезло большинство элементов. Доступны только те, которые могут быть использованы. Можно перемещаться по иконкам. Если два раза щелкнуть на изображение, то появится описание картинки. Используя команды редактирования из меню **Edit** или из меню, вызываемого нажатием правой кнопки мыши, можно скопировать изображение, которое выделено в буфер обмена, а затем поместить его в окно редактирования, попав туда через элемент меню **Window**. При работе с библиотеками предусмотрены элементарные функции поиска, которые были рассмотрены ранее в соответствующих разделах **Find in Library** и **Find Next in Library**. Основным ограничением на активное использование предоставляемых библиотек является отсутствие русскоязычного описания к структурным формулам. Наиболее полезны библиотеки, содержащие различные графические элементы для формирования производственных технологических схем и химической посуды.

4. ПРОГРАММЫ ISIS/DRAW, SYMYX DRAW, ACCELRYSDRAW

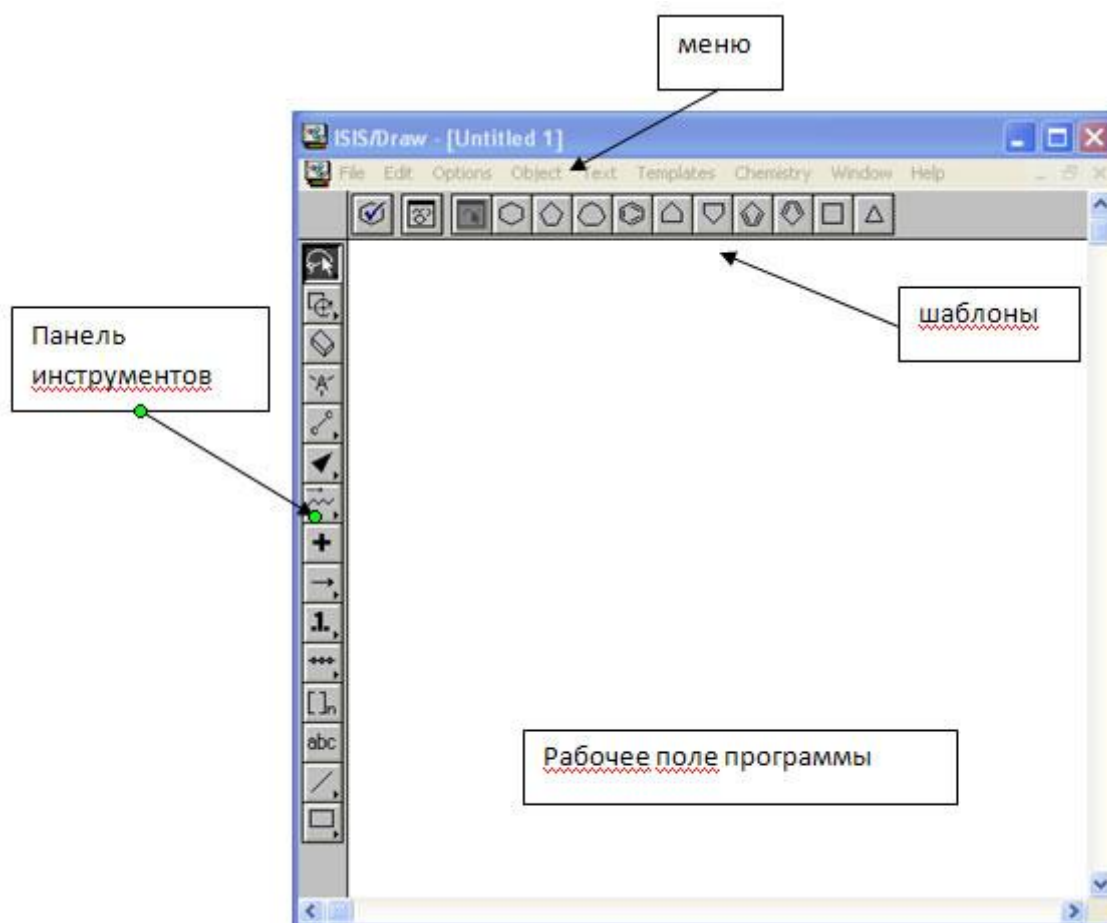
4.1. ISIS/Draw

ISIS/Draw – это программа для изображения химических структур, работающая в операционных системах семейства Windows, разработана MDL Information Systems (СИИА). MDL – это аббревиатура названия Molecular Design Limited. Она доступна бесплатно для академического и личного использования. В своё время её можно было получить на сайте фирмы (<http://www.mdli.com/downloads/>) после предварительной (бесплатной) регистрации либо на сторонних сайтах, распространяющих программное обеспечение. Программа играла роль интерфейса для ISIS/Base (химической базы данных той же компании), а также некоторых других продуктов ISIS (Integrated Scientific Information System). Первая версия программы была выпущена в 1990 г., а последняя версия (под номером 2.5) в 2002 г., следующая версия в связи с переходом к новому владельцу была выпущена под названием Symyx Draw 3.1, а затем Accelrys Draw 4.0 и 4.1. Как и ISIS/Draw, эти программы являются бесплатными для ученых. Интерфейс и основные функции рассматриваемых программ схожи.

ISIS/Draw использовала свой собственный формат файлов с расширением *.skc*, а также поддерживала стандартные химические форматы файлов, таких как MDLmol, Rxn и TG. Ввиду того, что ISIS/Draw играет роль программы подготовки запроса к базе данных, она поддерживает различные специальные атомы и типы связей, которые используются для поиска подструктуры, такие как шаблон атомов, ароматические шаблоны, шаблоны циклов, а также отображение атома, необходимые для поиска реакции. Хотя ISIS/Draw, в основном, является 2D программой для рисования, но она обладает некоторыми функциями 3D вращения и может взаимодействовать с программой RasMol для 3D визуализации рендеринга. В ISIS/Draw также включены функции проверки структуры и реакции, а также возможность вычисления элементарных свойств, таких как состав и молекулярная масса.

Основное окно программы организовано по стандартным для Windows-приложений с многооконным интерфейсом правил.

Работа с программой построена аналогично работе с другими графическими редакторами. Для выполнения действия (рисование фрагмента, химической связи, определение метки атома и т.д.) сначала выбирается соответствующий инструмент (слева от рабочего поля), а затем в рабочем поле с помощью манипулятора мышь выполняется действие.

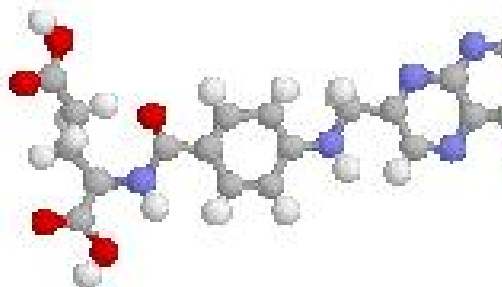
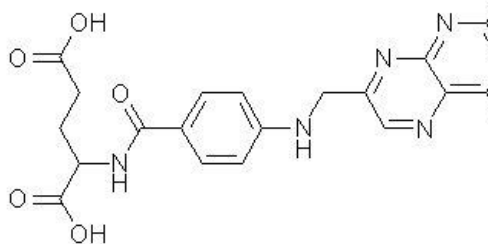


С кнопкой в панели инструментов может быть связано несколько действий. В этом случае в правом нижнем углу кнопки можно увидеть треугольник, при нажатии на который появляется панель с кнопками дополнительных инструментов. Можно выбрать, например, инструменты рисования двойных, тройных, стерео связей, инструменты выделения и т.д.

Зачастую полезным свойством прикладных программ в операционной системе MS Windows является возможность поддержки модели встраивания и связывания объектов – Object Linking and Embedding (технология OLE). Программа-сервер может вызываться из другой программы непосредственно для вставки объекта, который становится неотъемлемой частью документа. Документ, в который вставлен объект, называется контейнером, а программа, которая может встраивать в свои документы объекты других программ – клиентом OLE. Программа ISIS/Draw может являться как клиентом, так и сервером технологии OLE, поэтому может быть использована для вставки в документы программы MS Word.

Сначала обычным образом набирается текст. Затем, установив текстовый курсор в место, где предполагается размещение структурной формулы, нажимают кнопку на панели инструментов **Вставить объект** (то же можно сделать и через меню программы). В появившемся списке возможных объектов для вставки необходимо найти строку *Isis/Draw Sketch (pucu-*

нок *ISIS/Draw*) и нажать **Вставить**. Появляется окно программы, в котором производится манипуляция с рисунком – в нашем случае рисуется молекула фолиевой кислоты, здесь же показана 3D модель этой молекулы.



По окончании работы с рисунком из меню File программы ISIS выбирается пункт **Exit & Return to Microsoft Word...** В результате созданный объект будет помещен в текст, и можно продолжить набор материала в программе MS Word.

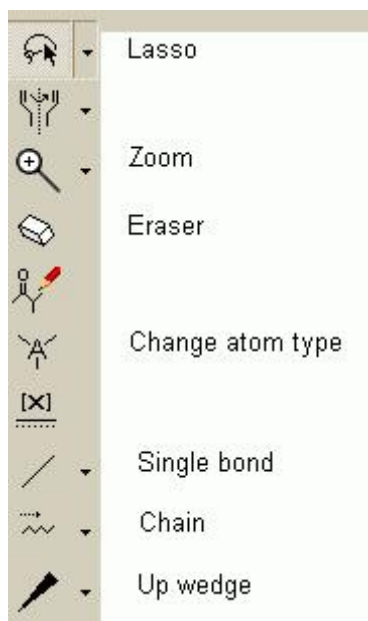
4.2. Symyx Draw

В 2008 г. новая версия была выпущена под именем Symyx Draw 3.1. Изменения состоят в поддержке быстрого и эффективного изображения структуры и ускорении рабочих процессов в целом ряде научных дисциплин. Ученые могут использовать встроенные конвертеры структуры в название и наоборот; создавать и редактировать молекулы полимеры, а также смеси веществ, структуры Маркуша, 3D структуры.

Усовершенствования для поддержки биомолекул сделали Symyx Draw 3.1 более настраиваемым, расширяемым и эффективным, чем ISIS/Draw для ученых, занимающихся исследованием биопрепаратов, и которым необходимо создавать, регистрировать и осуществлять поиск химически модифицированных пептидов или нуклеотидных звеньев. Переход от ISIS/Draw к Symyx Draw является достаточно безболезненным. Тем не менее, Symyx Draw 3.1 проще в использовании, чем ISIS/Draw, в силу своего универсального инструмента рисования, удобной функциональной панели инструментов, выбора символа, большой библиотеки защитных групп и других улучшений удобства эксплуатации. Symyx Draw также превосходит ISIS/Draw в поддержке стереохимических структур и предлагает большое число надстроек (например, расчеты и предсказание молекулярных свойств, нумерация, биодоступность, расчет при рисовании, инструменты изотопного распределение, средства для простого просмотра 3D). Кроме того, Symyx Draw обеспечивает лучшее качество презентаций и печати.

Программа Symux Draw работает под управлением Windows XP и более современных версий Windows. Инсталлятор программы можно скачать на сайте производителя или сторонних сервисов. Для установки программы необходимо запустить скачанный файл. Кроме того, дополнительно можно получить **add-ins** (надстройки, которые обеспечивают дополнительные возможности). Можно скачать отдельные надстройки или полный набор.

Окно Symux Draw имеет две панели инструментов: одна панель, слева, содержит кнопки для рисования и просмотра молекул. Вторая панель инструментов в верхней части имеет шаблоны для вставки предварительно выбранной молекулы, например, циклогексан и ароматические кольца.



Кнопки в верхней части левой панели инструментов, в том числе наиболее часто используемых, показаны слева. Внешний вид кнопки изменится в случае ее выбора. Таким образом, кнопки и их названия не будут выглядеть так, как показано на рисунке, они могут варьироваться в зависимости от выбора пользователя. Например, при выборе **Lasso** (Лассо), после нажатия мышкой соответствующая кнопка на панели становится светлее.

Ряд кнопок имеют небольшой черный треугольник справа. Если нажать на треугольник, то получается выпадающее меню с альтернативами для этого выбора. Например, кнопка инструмента **Single Bond** (Ординарная связь) может быть расширена, чтобы получить двойные или тройные связи.

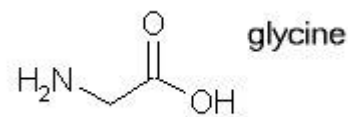
Кликните кнопку **Single Bond**, а затем нажмите на свободное пространство рабочего окна. Появится одинарная связь (в виде линии). На каждом конце этой линии подразумевается атом углерода, и кроме того, атомы водорода не показаны, но нужное количество водорода добавляется к каждому атому углерода автоматически.

Теперь наведите указатель мыши на любой конец линии и кликните по нему еще раз, в результате получится структура пропана (но не обязательно в той же ориентации).



Таким образом, можно создать любую структуру с помощью инструмента **Single Bond**. Кликая на атоме, где вы хотите создать новую связь, можно получить новую структуру с необходимым числом углеродных атомов.

Чтобы рисовать более сложные молекулы, например, аминокислоту глицин, нужно научиться создавать кратные связи и гетероатомы с необходимым числом атомов водорода.



Использование общего инструмента **Single Bond** позволит нарисовать цепочку из четырех односвязанных атомов углерода (необходимо сделать три клика). Нажмите на второй атом справа, чтобы добавить разветвление у атома углерода. Теперь нужно заменить атомы углерода на атомы кислорода и азота.

Для этого нажмите кнопку **Change atom type** (для простоты иногда будем называть просто кнопка **Atom**). Установите указатель на конечном углероде справа. Нажмите на клавиатуре кнопку «Enter», после чего появится раскрывающийся список. Кликните на стрелке, и выберите «O», чтобы изменить атом углерод на атом кислорода. Повторите эти действия на соседнем углеродном атоме (выберите "O"), т.е. просто нажмите «Enter». Теперь нажмите на концевой атом слева и измените его на азот (N) аналогичным образом.

При кислороде должна находиться двойная связь с разветвленным атомом углерода. Есть два способа, чтобы вставить двойную связь в Symux Draw. Можно нарисовать простую связь инструментом **Single Bond**, а затем нажать на связь снова, используя тот же инструмент. Это увеличит порядок связи. При повторном клике связь превратится в тройную (если это не противоречит валентности соответствующих атомов). При последующем клике связь вновь станет ординарной.

Кроме того, двойную связь можно получить с самого начала, выбрав двойную связь в выпадающем списке инструмента **Single Bond**. Чтобы получить этот инструмент, нажмите на маленький треугольник на общем инструменте **Single Bond**, и выберите двойную связь в выпадающем меню.

Затем можно поставить атомы водорода – по крайней мере, те, которые находятся при гетероатомах. Чтобы показать атомы водорода в структуре, перейдите в меню **Options** и выберите **Settings** (Настройки). В верхнем блоке элементов, называемом **Atoms**, есть пункт под названием **Show hydrogen labels** (Показать водород). Нажмите на него, после чего появится стрелка справа. Это стрелка указывает на выпадающее меню с выбором метода отображения водорода. По умолчанию этот параметр установлен на **Off** (Выкл). Чтобы показать атомы водорода у гетероатомов, выберите **On Hetero** (На гетероатомах). Чтобы показать, атомы водорода у терминальных гетероатомов (т.е. на концах молекулы), выберите **On Hetero or Terminal** (На гетеро или терминальных). Чтобы показать водороды около всех атомов, выберите **On All** (На всех) и нажмите кнопку **Apply** (Применить).

При составлении структур, которые будут преобразованы в 3D с помощью ViewerLite, нет необходимости отображать атомы водорода.

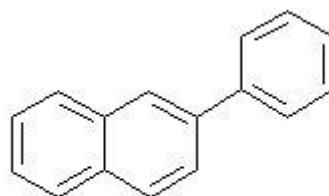
Если нужно изобразить атом элемента, который не входит в выпадающий список, при выборе атома выберите **More** (Дополнительно). Это приведет к появлению периодической таблицы, затем выберите требуемый элемент в таблице.

Существует альтернативная процедура. Вместо использования инструмента **Atom** (Атом) выберите атом(ы), которые нужно изменить, правой кнопкой мыши. Это дает вам доступ к меню **Atom Properties** (Свойства атома). Выберите **Atom symbol** (Символ атома). Откроется периодическая таблица, упомянутая выше. Для простых случаев этот способ, скорее всего, не имеет преимуществ. Тем не менее, она позволяет редактировать несколько выбранных атомов сразу, а также изменить другие свойства.

Symyx Draw содержит множество готовых шаблонов, которые могут быть использованы для ускорения рисования больших молекул.

Рассмотрим построение ароматического соединения с использованием шаблона на примере 2-фенилнафталина.

Шаблон значков (в панели инструментов в верхней части страницы) позволяет легко нарисовать часто используемые структуры, такие как циклы.



2-phenylnaphthalene

Кликните на бензольное кольцо. Снова кликните на странице в том месте, где будет кольцо. Теперь удерживайте указатель мыши на одной из связей кольца, так чтобы появилось еще одно кольцо. Нажмите еще раз, чтобы оно соединилось с первым кольцом. Теперь наведите указатель мыши на конкретный атом, и кликните, будет добавлено еще кольцо, связанное с другими двумя кольцами, и таким образом структура 2-фенилнафталина завершена. Если добавить это последнее кольцо к рядом стоящему атому, то получится 1-фенилнафталин.

В Symyx Draw имеется большое количество шаблонов в дополнение к основной структуре на панели шаблонов по умолчанию. Они доступны при использовании двух кнопок, находящихся слева в конце панели шаблонов. Самая левая кнопка, похожая на папку, высвечивается как **Template directory** (Каталог шаблонов). Нажмите на эту кнопку, и вы получите доступ ко всем имеющимся наборам шаблонов. При нажатии другой (невнятной) кнопки, **Change to different template toolbar** (Перейти к другой панели шаблонов), с маленьким треугольником-стрелкой, направленным вниз, от-

крывается меню, позволяющее сменить набор шаблонов. Действие с шаблоном во всех случаях одинаковое: кликнуть на шаблон структуры, а затем на рабочем поле страницы, чтобы вставить ее. Шаблоны структур могут быть добавлены сами по себе, или быть слитой с существующими связями или атомами, например, бензольным кольцом.

Существует несколько дополнительных возможностей в программе Symyx Draw, которые не требуются при рисовании простых структур, но могут быть полезными.

Инструмент **Lasso** (Лассо) позволяет выбирать любые части структуры. Выберите инструмент **Lasso**, нажмите левую клавишу мыши и протяните указатель мыши по структуре так, чтобы выбранные элементы попали в Лассо, затем отпустите кнопку. Модификация инструмента с помощью треугольника-стрелки на кнопке с маркировкой **Select tool** (Выбор инструмента) позволяет использовать прямоугольную рамку для выбора границы.

Выберите инструмент **Eraser** (Ластик) и удерживайте указатель мыши на части структуры (атоме или группе атомов), высветится «синяя коробка». Нажмите кнопку, чтобы удалить содержимое «синей коробки». Как альтернатива - нажмите левую клавишу мыши и протяните **Eraser** для удаления большего фрагмента.

Инструмент **Chain** (Цепь) позволяет легко нарисовать цепочки атомов углерода (например, для высших жирных кислот).



Выберите инструмент **Chain**, а затем нажмите и перетащите, чтобы создать цепочку атомов. Это экономит время, если вам нужно, чтобы нарисовать более 2 атомов в цепочке.

Можно расширить возможности этого инструмента путем нажатия на треугольник-стрелку в правой части кнопки.



Из полученного выпадающего меню выберете необходимый инструмент справа – **Multibond** (Множественные связи). Это более универсальный инструмент: с его помощью можно создать структуру, например, циклогексана.

Разница между инструментами **Multibond** и **Chain** состоит в том, что последний инструмент рисует только «прямые» цепи. Можно изменять направление цепи по желанию, но это будет просто зигзаг, направленный в одну сторону, а инструмент **Multibond** позволяет изменять направление.

Зачастую нарисованная молекула выглядит неаккуратно. Используя **Lasso**, выделите всю структуру, или перейдите в меню **Edit** (Правка) и кликните на **Select All** (Выбрать все). Теперь перейдите в меню **Chemistry** (Химия) и выберите пункт **Clean** (Очистка), который "приводит в порядок" структуру и может облегчить работу при создании более сложных молекул.

Symyx Draw при выборе этой функции использует номинальные углы и длины валентных связей. Обратите внимание, что эту операцию не нужно делать перед экспортом в ViewerLite; что является удобной особенностью данного химического редактора.

Для именования структур (**Naming structures**) из меню **Chemistry** (Химия) выберите **Generate Text from Structure** (Создать текст из структуры). Из выпадающего меню выберите **IUPAC name** (Название по ИЮПАК). Программа Symyx Draw назовет соединение, если оно имеет не очень сложную структуру. Кликнув мышкой на названии, можно будет оперировать им: переместить его в любое место на экране или удалить его с помощью **Eraser**.

Если на экране более одной структуры, Symyx Draw назовет все. В ряде случаев это может быть полезным, но создает дополнительные трудности при маркировке: получается одно текстовое поле со всеми возможными именами в нем, что не позволяет сохранять название для каждой структуры. Если необходимо назвать лишь одно соединение, то его нужно "выбрать" с помощью **Lasso**. Symyx Draw, в отличие от ISIS/Draw, различает и называет *E,Z*-изомеры для соединений с двойными связями.

Кроме наименования по правилам IUPAC, могут быть использованы другие способы описания структуры, например, SMILES – Simplified Molecular Input Line Entry Specification (спецификация упрощенного представления молекул в строке ввода), или InChI – (IUPAC) International Chemical Identifier (IUPAC или Международный химический идентификатор). Оба этих способа доступны из меню **Chemistry**.

SMILES – это система правил (спецификация) однозначного описания состава и структуры молекулы химического вещества с использованием строки символов ASCII. InChI недавно предложено IUPAC в качестве стандарта для линейного представления формул. SMILES имеет преимущества перед InChI, в частности, лучшее восприятие формул человеком, а также более простая программная поддержка в связи с наличием обширной теоретической базы — теории графов. В терминах теории графов SMILES представляет собой строку, полученную путём вывода символов вершин молекулярного графа в порядке, соответствующем их обходу в глубину. Первоначальная обработка графа включает в себя удаление атомов водорода и разбивку циклов таким образом, чтобы получившийся граф представлял собой остовный лес. Местам разбиения графа ставятся в соответствие числа, показывающие наличие связи в исходной молекуле. Для указания точек ветвления молекулы используются скобки.

Программа Symyx Draw позволяет строить различные конформации циклов, показывать циклические цис- и транс-изомеры, а также экватори-

альные и аксиальные заместители. Для отображения стереосвязей возможно использовать клиновидные связи.

Иногда необходимо маркировать «атом» (или иную позицию в структуре) чем-то отличным от обычного символа элемента, например, D для дейтерия, X для любого галогена, Me для метила и т.п. Ранее способ (замена атомов одного элемента, углерода, другим элементом, кислородом или азотом) был показан при построении молекулы глицина. Аналогично можно ввести не обозначения элементов, а некие желаемые символы.

Некоторые дополнительные символы доступны из меню **Extended periodic table** (Расширенная периодическая таблица). Перейдите к **Periodic Table**, как описано ранее, установите флажок для **Show Extended Table** (Показать расширенную таблицу). В нижней части таблицы появится дополнительная строка символов, в том числе включающая символы D для дейтерия или X для галогенов.

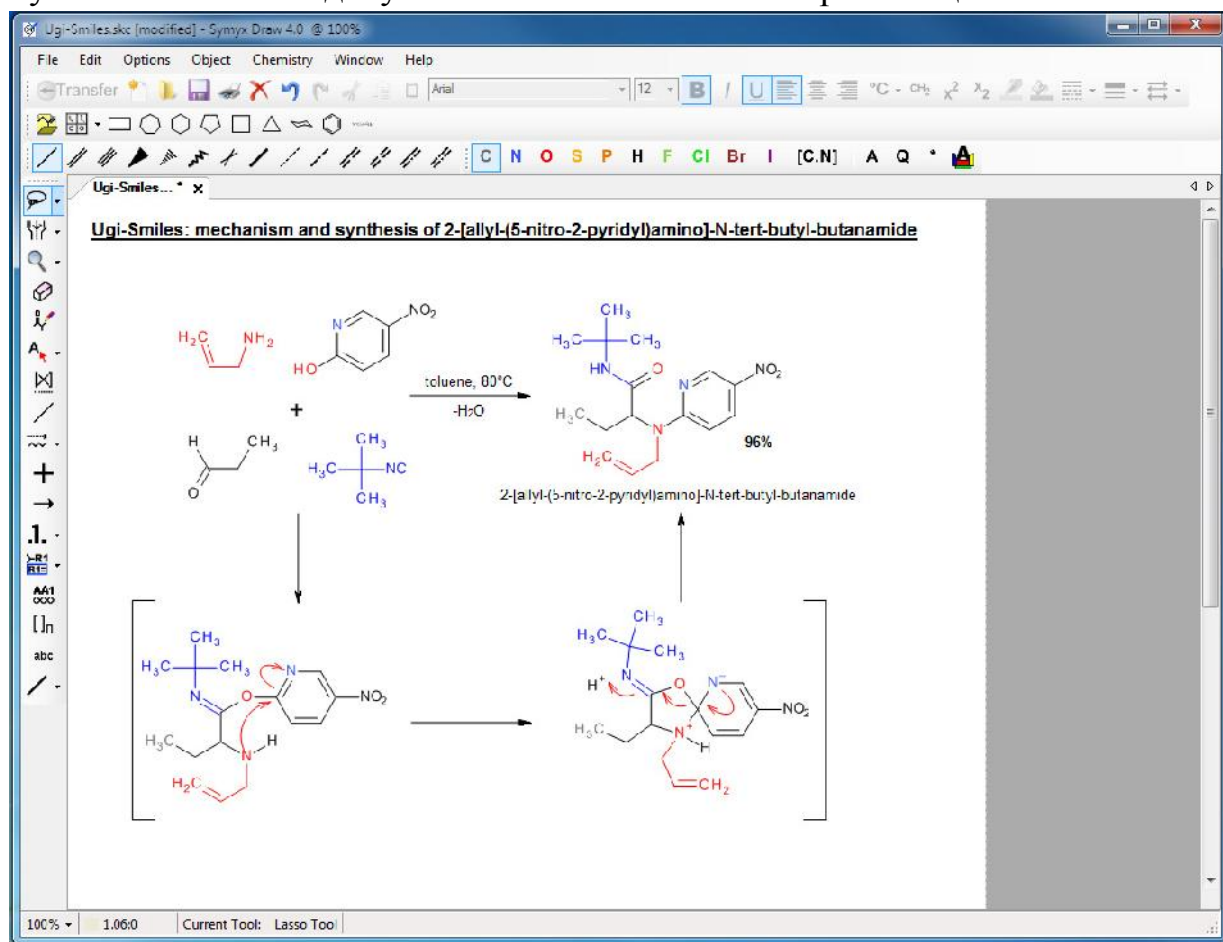
Кроме того, можно создавать свои собственные символы и сокращения. Для этого нужно установить флажок **Create chemical template/abbreviation** (Создать химический шаблон/сокращение). При использовании инструмента **Atom**, следует выбрать последнюю строку в выпадающем меню **Create abbreviation** (Создать сокращение). Если щелкнуть правой кнопкой мышки на выбранном атоме, то в контекстном меню нужно выбрать пункт **Create template/abbreviation** (Создать шаблон/сокращение). В появившемся поле необходимо ввести нужный символ и подтвердить произведенное изменение.

4.3. Accelrys Draw

Accelrys Draw имеет тот же интерфейс и основные функции, что и ISIS/Draw (в заголовке окна отображается как Symyx Draw), но придает дополнительную скорость и эффективность при изображении химической структуры:

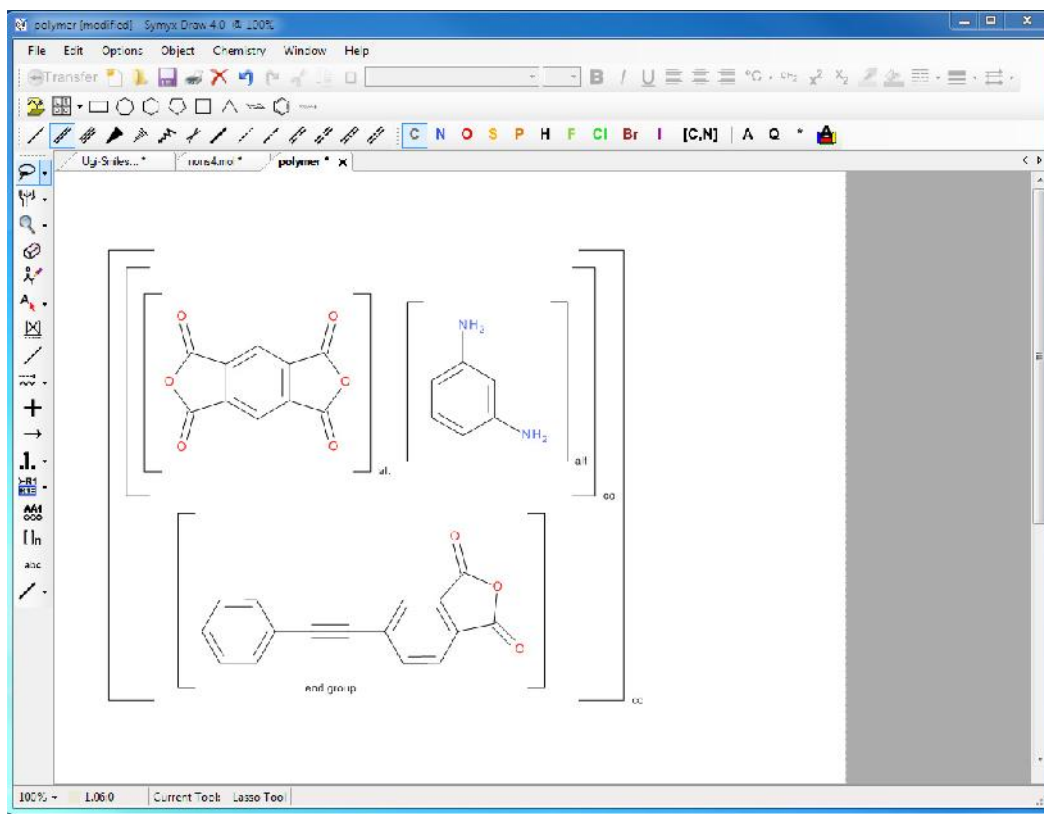
- непрерывное рисование связей, вставка циклов, добавление атомов с помощью многоцелевого инструмента для рисования;
- использование технологии drag-and-drop для часто используемых структур и химических сокращений на панели инструментов для повторного использования;
- показ свойств атома, связи, фрагмента или параметров запроса при клике правой кнопкой мыши;
- возможность многократного использования функций **Undo/Redo** (откат/повтор);
- облегченное создание структур для поисковых запросов или перечислений с помощью Rgroups (структуры Маркуша);

- возможность пояснения схем реакций с помощью текста, цвета и стрелок различных стилей;
- создание структур с качеством, пригодным для печати, в том числе путем включения в документы Microsoft Office и презентации.

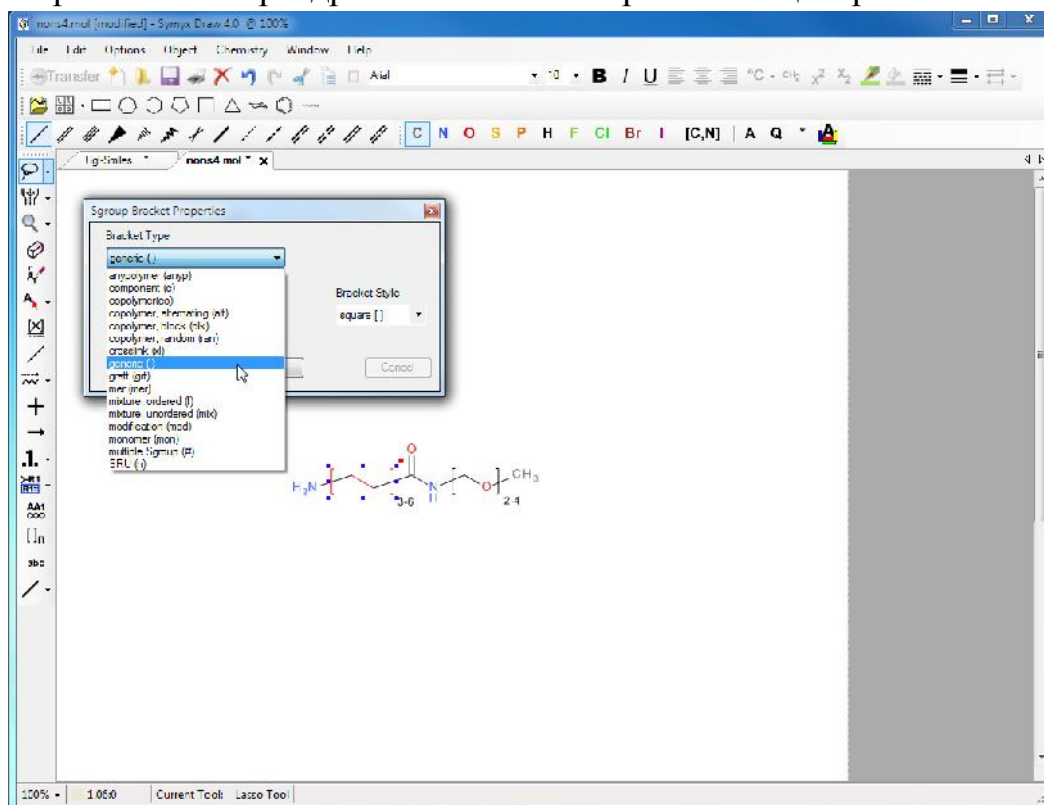


В качестве приложения корпоративного программного обеспечения Accelrys Draw предлагает гибкую интеграцию с пользовательскими приложениями на основе Java и .NET, а также интеграцию с приложениями Accelrys Isentris и ISIS: для настройки стиля химических структур в соответствии с потребностями организации используется XML, для создания запросов и просмотра используются веб-приложения. Возможно как наименование структуры по правилам IUPAC, так и обратное действие – построение структуры по имени. Используются и такие способы описания структуры, как SMILES и InChI.

Программа позволяет создавать и редактировать эскизы в формате ISIS, используя усовершенствованную функцию очистки структуры, инструменты рисования подобны тем, что использовались в программе ISIS/Draw. Программа позволяет вести расчет свойств одновременно с рисованием структуры. Возможно создавать и редактировать полимеры, составы и смеси (Sgroups).

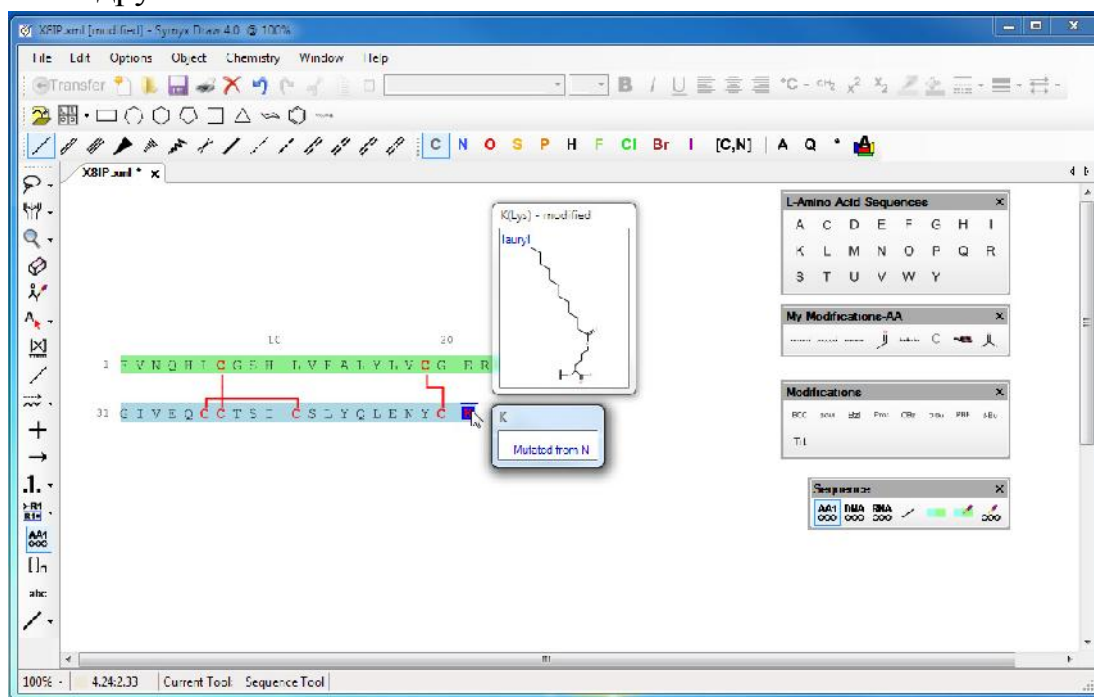


Расширены возможности с 3D-моделями молекул, в том числе создание и редактирование поисковых запросов. В программе можно использовать для обозначения атомов и их групп дополнительные, в том числе, составные символы. Имеется обширная библиотека шаблонов защитных групп. Благодаря алгоритму NEMA улучшено распознавание и отображение асимметрических тетраэдрических и геометрических центров.



Для биохимиков Accelrys Draw предоставляет большие возможности для работы со структурами пептидов или нуклеотидных последовательностей. Среди них:

- создание 1- и 3-буквенных последовательностей пептидов, ДНК или РНК с помощью инструмента **Sequence**;
 - показ пересечения связей, дисульфидных мостиков и присоединение защитных групп в боковую цепь;
 - преобразование текста из буфера обмена в формате FASTA, Swiss-Prot, PDB и EMBL в химические цепи биомолекул;
 - разворачивание остатков в последовательности полным составом, для иллюстрации химических модификаций;
 - создание цепи комплементарной к существующей в один шаг;
- и многие другие.



Accelrys Draw может быть встроена в браузер Microsoft Internet Explorer и поддерживает операционные системы Microsoft Vista, Windows 7 и офисное программное обеспечение Microsoft Office 2003/2007/2010. Расширить функции Accelrys Draw можно с помощью пользовательских надстроек, например, конвертора структуры 2D в 3D, нумератора, расчета биологической активности, изотопного распределения и др., некоторые из таких надстроек требуют отдельной лицензии, такие как, калькулятор ACD/Labs или ACD/ Name.

5. ВИЗУАЛИЗАЦИЯ МОЛЕКУЛЯРНЫХ СТРУКТУР С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ПРОГРАММЫ HYPERCHEM 8.0

Пользовательский интерфейс программы HyperChem во многом аналогичен программам пакета ChemOffice и других приложений Windows. В верхней части экрана окна располагается основное (главное) меню, чуть ниже его находится панель управления.



На поле визуализации будут отображаться все нарисованные молекулярные структуры. По умолчанию поле визуализации имеет черный фон. При желании цвет фона можно изменить, например, на более привычный белый, в пункте **Preferences** (Настройки) главного меню **File** (Файл). В нижней части экрана располагается статусная строка, в которой, в зависимости от режима работы программы, отображается ход вычислительного процесса, подсказки или результаты вычислений. В правом углу строки состояния высвечивается сокращенное название модуля вычислительного алгоритма, который в данный момент используется программой.



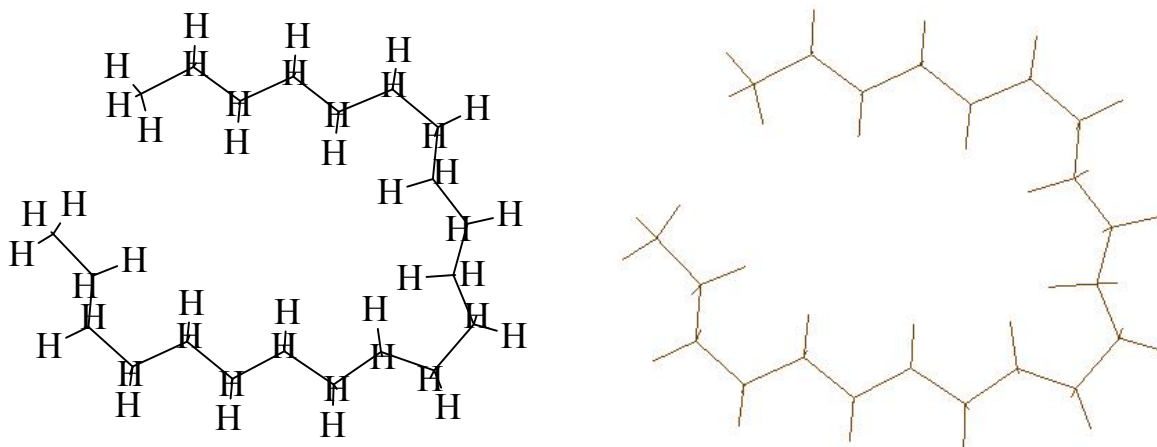
Принцип работы программы таков, что для конкретной молекулярной модели, загруженной в окне визуализации, можно решать однотипные задачи, например, минимизировать энергию молекулы, используя различные методы компьютерной химии. Выбор метода производится в пункте **Setup** главного меню.

Отметим, что в отличие от рассмотренных ранее программ, HyperChem работает в однооконном режиме, так как данный пакет предназначен, в первую очередь, для решения вычислительных задач компьютерной химии. Поскольку все они требуют значительных компьютерных ресурсов, одновременная работа с несколькими моделями затруднительна.

5.1. Создание и редактирование молекулярной модели

Простейшим способом создания молекулярной структуры является создание двумерной структурной формулы данного соединения в каком-нибудь из двумерных химических редакторов. Затем следует сохранить структуру в одном из следующих форматов: .mol, .skc, .chm (не спутайте с файлом справки Windows, которые имеют такое же расширение, требуемый файл должен был сохранен в формате ChemDraw 3.x). После запуска HyperChem такой файл можно открыть с помощью пункта меню **File – Open...**, к сожалению, невозможно напрямую скопировать структуру из редактора и через буфер обмена Windows вставить в поле визуализации. Ре-

зультат подобного экспорта молекулы $C_{21}H_{44}$ из редактора ChemSketch посредством mol-файла выглядит следующим образом (слева – в исходном редакторе после 3D-оптимизации, справа – после импорта открытия в HyperChem):



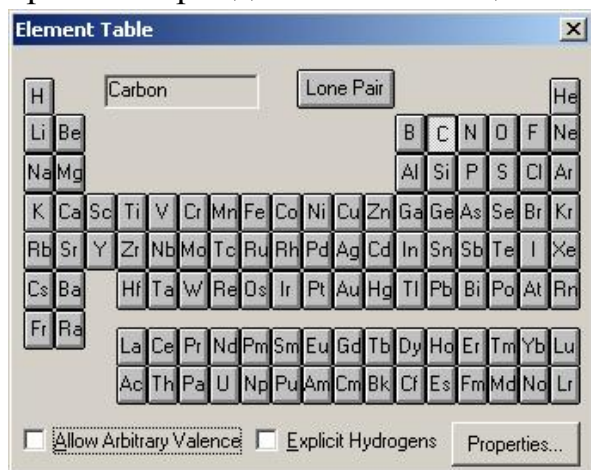
Некоторые заготовки молекул (например, аминокислоты, нуклеиновые кислоты, кристаллы, углеводы, полимеры) можно добавлять из главного меню **Databases** (Базы данных). Кроме того каталог **Samples** (Примеры), находящийся в том же каталоге, куда установлена программа, по умолчанию **Hyper80**, содержит множество уже готовых органических и неорганических соединений.

Программа HyperChem, к сожалению, не позволяет создавать молекулярные структуры сразу по названию или брутто-формуле. Поэтому при отсутствии у вас других химических программ основным способом создания молекулярных структур в HyperChem является создание их из простейших элементов или редактирование заготовок из базы данных непосредственно в окне визуализации. Порядок построения новой трехмерной модели следующий. Сначала в поле визуализации из атомов, составляющих скелет молекулы (углерод, кислород, азот и т.д.), формируется двумерная модель. При этом можно не слишком заботиться о геометрической форме молекулы: длинах связей и валентных углах. Главное, чтобы была воспроизведена правильная топологическая структура. Затем при помощи пункта **Add H & Model Build** (Добавить водород и построить модель) пункта главного меню **Build** (Построение) осуществляется преобразование данной структуры в трехмерную. В процессе преобразования программа автоматически добавляет к скелету нужное количество атомов водорода и устанавливает общепринятые в химии значения длин связей и валентных углов между атомами.

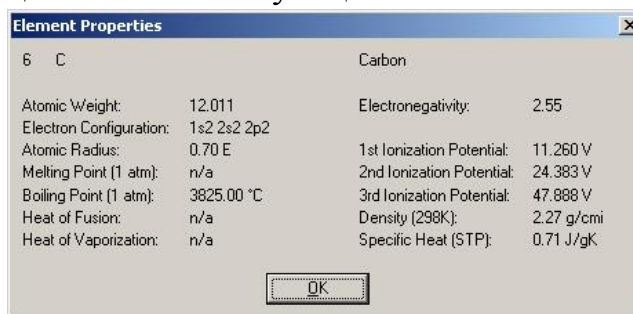
Панель управления HyperChem содержит несколько клавиш, используемых для создания и редактирования модели: их назначение мы разберем попутно. При нажатии каждой клавиши курсор приобретает вид обозна-

ченного на ней символа, напоминая пользователю таким образом о том, в режиме какой функции он в данный момент находится.

Для создания атомов и связей молекулы служит кнопка  **Draw** (Рисование). Чтобы создать новый атом, нажмите эту клавишу и щелкните мышью в любом месте поля визуализации. Возникший в данной точке кружочек будет символизировать положение нового атома. По умолчанию рабочим атомом в программе установлен углерод. Для того чтобы изменить тип атома, необходимо дважды щелкнуть на кнопке **Draw**, после чего откроется периодическая таблица элементов с кнопками для выбора атомов.



При помощи кнопки **Properties** (Свойства) для выбранного атома можно открыть справочное окно, в котором собрана полезная информация о соответствующем элементе.



Для того чтобы создать связь, необходимо провести линию с нажатой левой клавишей мыши. Щелчок левой клавишей мыши на уже созданной связи увеличивает ее порядок (делает связь двойной, тройной); щелчок правой клавишей уменьшает порядок связи. Для того чтобы сделать кольцо ароматическим, дважды кликните по кольцу (при этом в нарисованном ранее кольце не обязательно должны быть кратные связи). Кольцо отображается с пунктирными линиями.

Выберем в качестве рабочего атома углерод и создадим для примера модель молекулы циклогексадиена-1,4. Создание цепочки связей производится проведением нескольких последовательных линий в нужном направлении. Неудачно созданные связи или атомы удаляйте щелчком правой клавиши мыши. Если предварительно выделить определенный атом или связь, то вращение будет осуществляться относительно их.

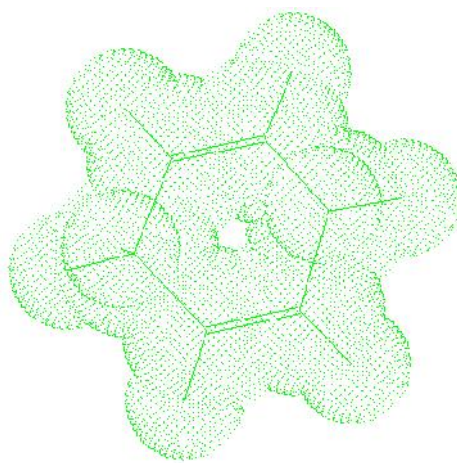
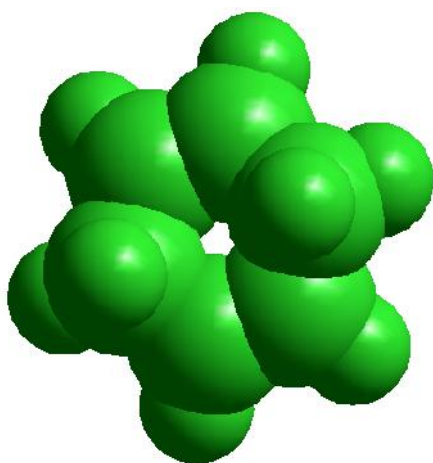
Для того чтобы пронумеровать атомы, необходимо выбрать пункт **Labels** в меню **Display**. Откроется диалоговое окно **Labels** (Метки). Выберите **Number** (Номер) как метку атомов и нажмите **OK**. Этот шаг упрощает дальнейший процесс рисования 2D структуры.

В нарисованной структуре можно заменить один элемент на другой. Откройте диалоговое окно таблицы элементов и установите базовый элемент на азот. Щелкните по соответствующему атому для того, чтобы поме-

нять его на азот. Аналогично можно заменить углерод кислородом. Чтобы расставить метки-символы для атомов, выберите пункт **Labels** в меню **Display**: появится диалоговое окно **Labels** (Метки). Выберите **Symbol** (Символ) в качестве атомной метки, а затем нажмите **OK**.

Преобразуем рисунок в 3D-структуру. Перед началом этой операции необходимо проверить, чтобы пункт **Explicit Hydrogens** меню **Build** не был выбран. Дважды щелкните по кнопке  **Select**. Вместо того чтобы выбрать пункт **Add H & Model Build** в меню **Build**, можно вызвать молекулярный построитель двойным щелчком на кнопке **Select**.

Выбрать форму представления модели, в наибольшей мере отвечающую задачам анализа можно с помощью пункта меню **Display – Rendering...** Среди возможных методов отображения молекул: **Sticks** (Стержни), **Balls** (Шары), **Balls and Cylinders** (Шары и цилиндры), **Overlapping Spheres** (Перекрывающиеся сферы), **Dots** (Точки), **Tubes** (Трубки), **No Change** (Без изменений). К каждому представлению можно добавить точки с помощью кнопки **Add Dots**. Каждый из этих методов отображения по-своему хорош и имеет также ряд дополнительных настроек во вкладках.



Отображение модели можно сделать еще более эффектным, если у вас установлена программа **POV-RAY**. В этом случае можно визуализировать молекулу с помощью трассирующих лучей (пункт **Raytrace** пункта главного меню **Display**).

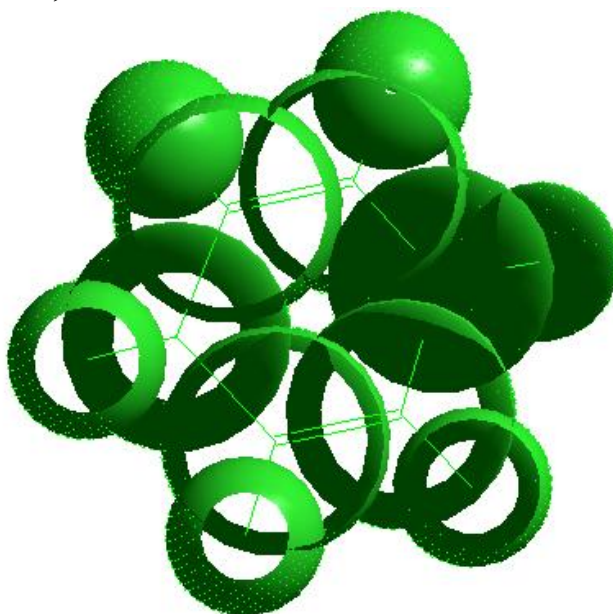
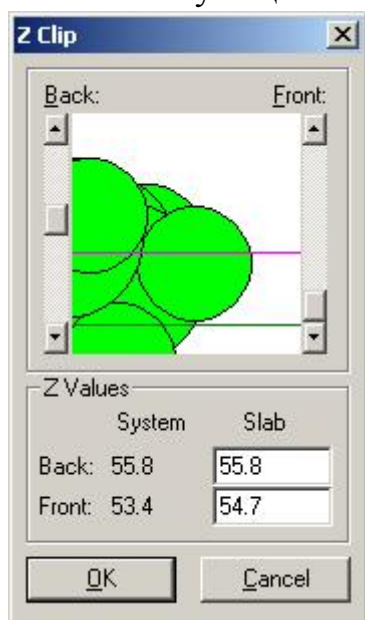
Для подробного изучения трехмерной модели используются кнопки вращения  (в трех измерениях и в плоскости экрана, соответственно) и перемещения. Вращать можно как всю молекулу, так и ее отдельные элементы относительно выделенных.

Translate  (Перемещать). Позволяет перемещать молекулу по плоскости экрана.

Z-Translate  позволяет перемещать молекулу по оси Z, которая располагается перпендикулярно плоскости экрана.

Изменение масштаба изображения в окне визуализации производится с помощью кнопки  **Magnify/Shrink**. Более точно масштаб изображения можно задать в пункте главного меню **Edit – Zoom**.

Иногда возникает необходимость отобразить на экране не всю молекулу, а только некоторый участок, расположенный между двумя параллельными плоскостями. В HyperChem для этой цели имеется средство, называемое **Z-Clipping** (Нарезка по оси Z). При его использовании видимым остается только «ломтик» молекулярной структуры, расположенный между двумя заданными плоскостями, перпендикулярными оси Z. По умолчанию вырезающие плоскости расположены впереди и сзади молекулярной структуры, так, что на экране она отображается полностью. Кнопка  (**Z-clipping planes**) позволяет создать сечение молекулы двумя секущими плоскостями, перпендикулярными оси Z. Для того чтобы определить расположение секущих плоскостей, дважды щелкните на данной кнопке. В открывшемся окне **Z Clip** видно расположение молекулярной структуры между двумя линиями, указывающими расположение секущих плоскостей. Передвигая ползунки слева и справа от окна, можно настроить их расположение таким образом, чтобы плоскости вырезали нужный участок молекулы. Ниже приведен пример подобной операции, выполненной на ранее построенной молекуле циклогексадиена-1,4.



Ваша структура может быть ориентирована как-либо иначе, в зависимости от того, как были позиционированы исходные атомы. Иногда молекулярный построитель переориентирует молекулярную структуру. Молекула строится с некоторым набором параметров по умолчанию. Измерением этих параметров мы и займемся.

Измерение физических характеристик молекулярных структур осуществляется с использованием различных техник выделения. Выделяя различные части молекулы можно измерять длины связей и углы, а также отображать характеристики атома, такие как заряды и X,Y,Z координаты.

5.2. Атомные характеристики

Чтобы получить информацию по характеристикам атомов, прежде всего проверьте в меню **Select**, чтобы пункт **Atoms** был выбран, а **Multiple Selections** – нет.

Нажмите кнопку **Select**, кликните на выбранном атоме, он подсвечивается, а характеристики атома появляются в строке состояния.

Строка состояния отображает атомный номер, тип атома, заряд для силового поля ММ (молекулярной механики). Также отображаются X,Y,Z координаты атома. Пункты меню **Build**, такие как **Set Atom Type**, **Set Charge**, **Constrain Geometry**, становятся активными. Это дает возможность определить пользовательские параметры атома для молекулярного построителя. Для отмены выделения щелкните правой кнопкой мыши в свободном поле рабочего окна.

Измерение длин связей

Если выбрать связь, а не атом, то в строке состояния будет отображена информация по этой связи. Программа HyperChem имеет библиотеку стандартных длин связей между атомами определенного типа и гибридизации. Если соответствующей длины связи нет в библиотеке, программа для молекулярного построения использует среднее от ковалентных радиусов двух атомов. Чтобы измерить длину связи, щелкните по углерод-кислородной связи. Связь будет подсвечиваться, а ее длина будет отображена в строке состояния. Откройте меню **Build**. Когда вы выбрали связь, пункт **Constrain Bond Length** становится доступным. Это позволяет вам изменить длину связи, определив, таким образом, пользовательскую длину связи для молекулярного построителя. Для того чтобы изменить расстояние между атомами выделенной связи, откройте пункт меню **Edit**. При выделенной связи в нем становится доступным пункт **Set Bond Length** (Установить длину связи). При выборе его открывается поле ввода, в котором отображена текущая длина связи. Изменив ее значение и нажав кнопку **OK**, вы получите новое значение расстояния между атомами выделенной связи.

Измерение валентных и двугранных углов

Для того чтобы измерить валентный угол между тремя смежными атомами, удерживая левую кнопку мыши, проведите указатель мыши между двумя атомами, которые соединены с общим третьим атомом. Например, удерживая нажатой левую кнопку мыши, соедините связанные с ки-

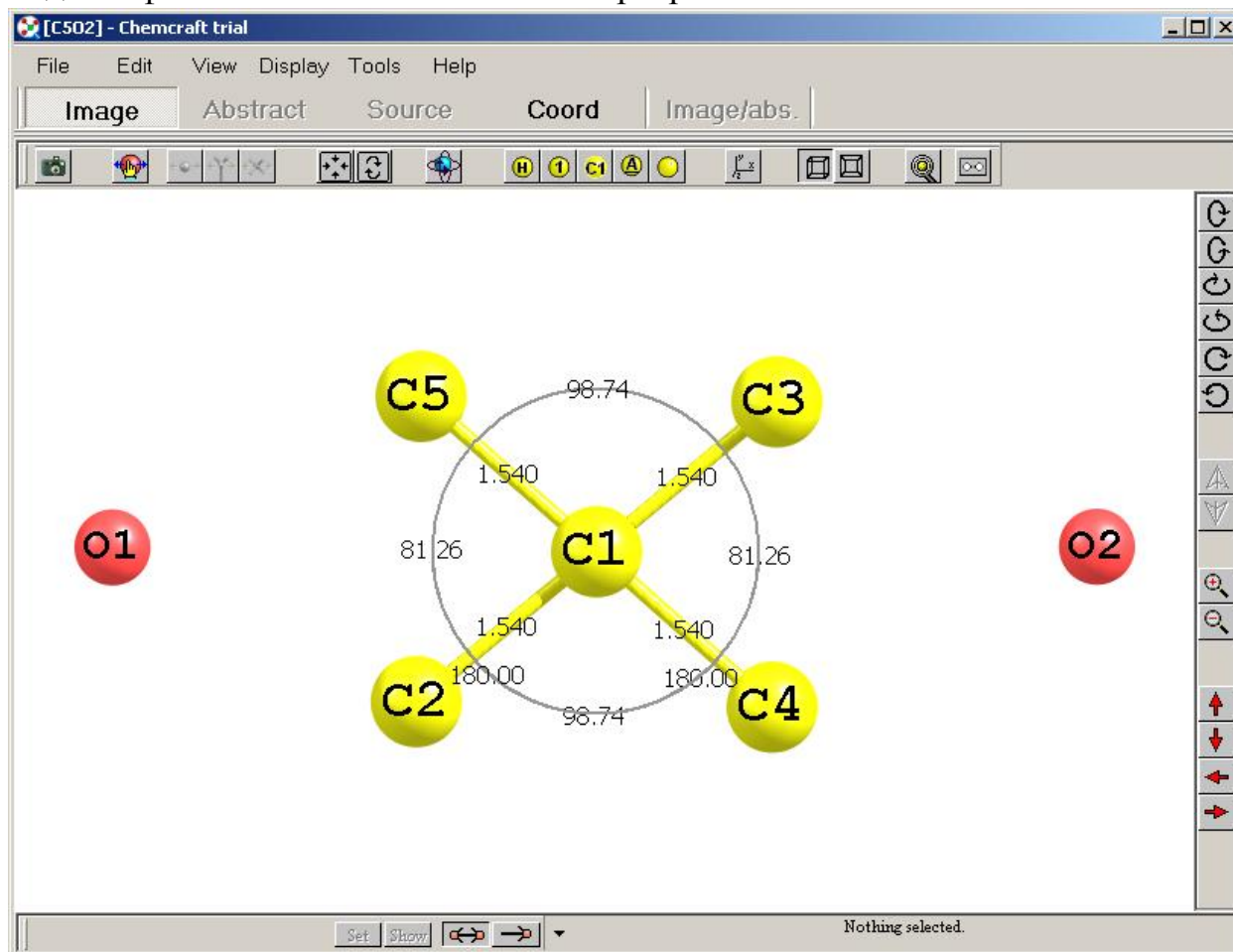
слородом атомы углерода и водород. Обратите внимание на встроенный эффект «притяжения» курсора к ближайшему к нему атому. Выделенный угол будет подсвечен, и его величина появится в строке состояния. Валентные углы, устанавливаемые по умолчанию молекулярным строителем, базируются на гибридизации и могут быть тетрагональными (109°) тригональными (120°) и линейными (180°). Обратите внимание на то, что, когда вы выбрали валентный угол, пункт **Constrain Bond Angle** в меню **Build** стал активным, что позволяет установить новое пользовательское значение валентного угла. Для изменения значения валентного угла между выделенными тремя атомами выберите пункт **Set Bond Angle** в пункте меню **Edit**. В открывшемся поле ввода установите новое значение угла в градусах.

Выделение и редактирование двугранного угла производится аналогичным образом. В этом случае необходимо провести указателем мыши с нажатой левой кнопкой между ближайшими четырьмя атомами. Для выделенного двугранного угла в статусной строке будет отображено его текущее значение. Изменить его можно, выбрав пункт **Set Bond Torsion** в пункте меню **Edit**, который при выделенном угле становится доступным.

Для измерения расстояний и углов между валентно не связанными атомами включите пункт **Multiple Selection** в пункте меню **Select**. В этом случае при последовательном выделении нескольких атомов предыдущее выделение не будет отменяться. Для отмены выделения атома щелкните на нем правой кнопкой мыши. Если выделить два валентно не связанных атома, то в статусной строке автоматически будет отображено расстояние между ними. При выделении трех валентно не связанных атомов в статусной строке будет отображено значение угла (**Improper angle**), который они образуют. При выделении четырех валентно не связанных атомов статусная строка будет отображать значение двугранного угла между ними **Improper torsion angle**.

6. ПРОГРАММА CHEMCRAFT

Программа ChemCraft – графическая программа для работы с трехмерными моделями молекул, визуализации результатов квантово-химических расчетов, предоставляющая удобный интерфейс для просмотра и анализа расчетных файлов и различные утилиты для подготовки новых заданий. В основном программа разработана как средство визуализации выходных файлов квантово-химических программ **GAMESS** и **Gaussian**.

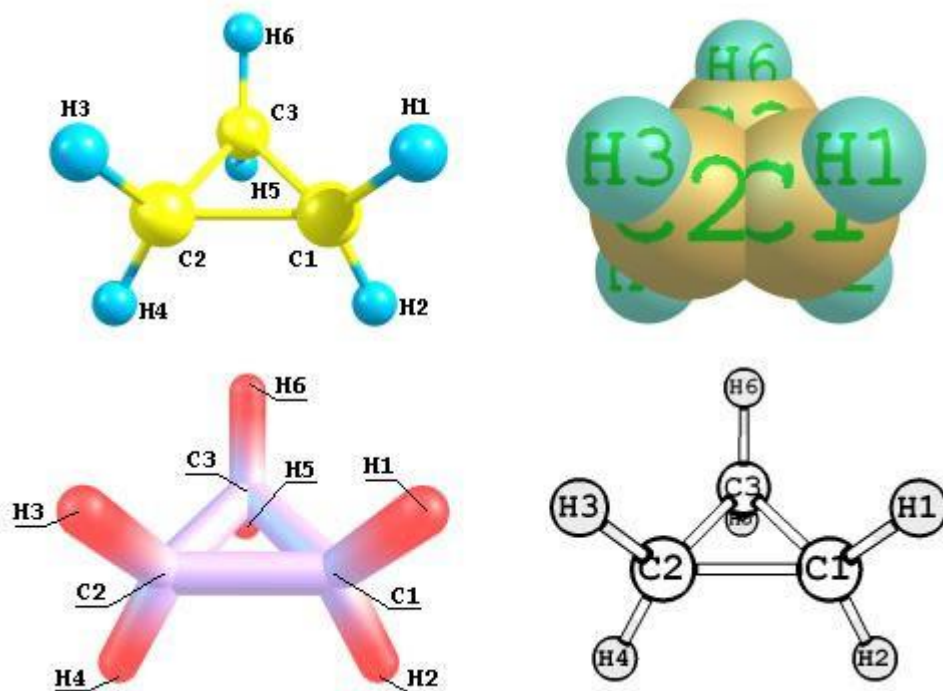


6.1. Основные возможности программы

- отображение 3D изображений молекул по декартовым координатам атомов, с возможностью просмотра или модификации любого геометрического параметра в молекуле (расстояния, угла);
- визуализация расчетных файлов **GAMESS** и **Gaussian**, включая просмотр отдельных геометрий из файла (оптимизированная структура, геометрия отдельного шага оптимизации и др.), анимацию мод колебаний, графическое представление градиента энергии, визуализацию молекулярных орбиталей в виде изоповерхностей, отображение графика сходимости ССП и др.;
- различные средства для конструирования молекул и модификации молекулярной геометрии: использование стандартного набора молекуляр-

ных фрагментов, "перетаскивание" атомов или фрагментов с помощью мыши, придание молекуле требуемой симметрии и другие возможности;

- получение качественных цветных 32-битных изображений молекул в различных графических стилях, содержащих требуемые обозначения (надписи, линии и др.), высокого (издательского, презентационного) качества, которые легко экспортируются в Word или другой текстовый редактор;

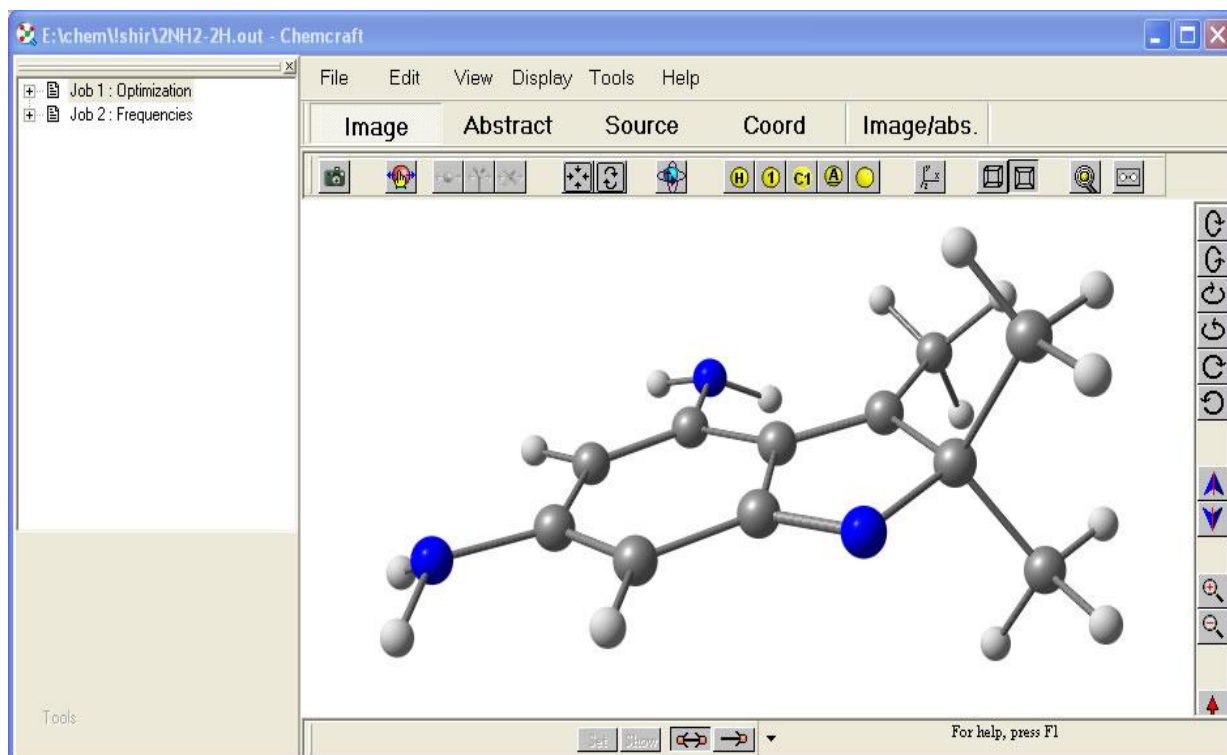


- создание анимированных изображений молекулярных структур.

Программа ChemCraft сочетает в себе качественный графический интерфейс и возможности, полезные для химиков, занимающихся изучением структуры молекул и, особенно, работающих в области квантовой химии.

Скачать последнюю версию программы можно по адресу <http://www.chemcraftprog.com/download.html>. Ее можно бесплатно использовать в течение 150 дней, после чего потребуется применить регистрационный ключ, для получения которого нужно купить программу. Там же доступна бесплатная версия с урезанными функциональными возможностями.

Окно программы приведено ниже. Панель слева отображает доступные результаты (если открыт выходной файл квантово-химического расчета – на рисунке видно, то доступны результаты оптимизации геометрии (слово **Optimization**) и расчета молекулярных колебаний (слово **Frequencies**). Большая область справа – рабочее окно, в котором изображается молекула. Вокруг рабочей области располагаются различные панели инструментов.



Имеется четыре режима работы рабочей области:

Image – 3D модель молекулы;

Abstract – приводится краткое описание структуры из файла расчетов;

Source – изображается фрагмент текста выходного файла квантово-химического расчета, из которого взята изображаемая геометрия молекулы;

Coord – режим позволяет импортировать или экспортировать координаты атомов в текстовом формате (в ангстремах или борах). При переключении в этот режим обновляется текст с координатами; при переключении с этого режима на другой по тексту с координатами обновляется текущая молекула (если в тексте были сделаны изменения). Кнопки **Copy** и **Paste** помогают копировать текст с координатами в буфер обмена или из буфера на экран. Если нажать **Paste** дважды, программа автоматически переключается в режим **Image**. Формат введенного текста может быть очень произвольным (читаются все таблицы с координатами из выходных файлов **GAMESS** и **Gaussian**). Если нужно восстановить случайно измененный текст в окне, можно нажать **Show sequence** или **Angstroms/Bohrs**.

При работе с изображением молекулы (режим **Image**) можно использовать следующие операции:

Левая кнопка мыши – Выделить атом/отменить выделение;

Правая кнопка – Отменить выделение всех атомов;

Правая кнопка+движение мыши – **Вращать молекулу**;

Ctrl+правая кнопка+движение мыши – **Перемещать молекулу по оси X,Y**;

Shift+Ctrl+правая кнопка+движение – **Перемещать молекулу по оси Z**;

Двойной щелчок левой кнопкой – Изменить тип атома/связи, надпись на атоме или связи;

Двойной щелчок правой кнопкой – Изменить стиль атома/связи (цвет, размер и т.д.).

Отображаемую молекулу можно также вращать и перемещать с помощью кнопок справа на главном окне программы и клавиш **Num1-Num9** (цифровые клавиши на клавиатуре справа). Нажатие кнопки  задает новый центр, вокруг которого вращается молекула (им становится центр координат молекулы, либо, если часть атомов выделена, центр координат выделенных атомов).

6.2. Работа с молекулярной структурой

Чтобы просмотреть значение геометрического параметра в молекуле (расстояния, угла или двугранного угла), нужно выделить соответствующие 2, 3 или 4 атома левой кнопкой мыши; значение будет показано в текстовом окне внизу. Для выделения новых атомов необходимо сначала отменить выделение старых, щелкнув на экране правой кнопкой мыши. Кнопка **Show** справа от значения отображает значение геометрического параметра на рисунке молекулы. Выбранный параметр можно изменить, введя в текстовом окне новое значение и нажав кнопку **Set**. При этом, если нажата кнопка , изменится координата только последнего выделенного атома, а если нажата кнопка , симметрично переместятся первый и последний выделенный атомы. Вместе с этими атомами перемещаются также связанные с ними атомы; если это нежелательно, следует вручную удалить связи или добавить новые. Чтобы удалить или добавить связь, можно выделить 2 атома и нажать Ctrl+B.

Меню **Edit/Drag atoms** или кнопка  позволяют передвигать атомы на изображении молекулы с помощью мыши. При «перетаскивании» атома его можно перемещать по оси Z клавишами **Num2** и **Num8**. Кнопки , ,  позволяют выбрать режим «перетаскивания атомов», «перетаскивания фрагментов» и «перетаскивания молекул»; последние 2 режима позволяют передвигать мышью группы атомов.

Построение новой молекулы

Для построения новой молекулы можно использовать пункты меню **Edit/Add atom** и **Edit/Add fragment**, которые добавляют к текущей молекуле новые атомы или молекулярные фрагменты (радикалы и др.). В про-

грамме предусмотрена возможность редактировать набор стандартных фрагментов и добавлять в него собственные фрагменты (меню **Edit/Add selected fragment to database**). Нажатие Ctrl+C, Ctrl+V позволяет копировать фрагменты через буфер обмена (например, чтобы перенести радикал с одной молекулы на другую). Если выделить один атом и выбрать **Edit/Add atom** или **Edit/Add fragment**, новый атом/фрагмент появится прикрепленным к этому выделенному атому. Если выделен атом водорода или фиктивный (X), новый атом/фрагмент заменит его.

Получение рисунка молекулы

Отображаемый рисунок молекулы можно сохранить в файл (меню **File/Save image**), либо скопировать в буфер обмена (меню **Edit/Copy page** или кнопка ) и затем вставить, например, в документ Word.

Меню **Display** позволяет выбрать графическую схему, в которой отображается текущая структура. Каждая схема определяется набором параметров, таких как цвет и размер атомов и связей, освещение и др. Пункт **Display/Customize** позволяет изменить эти параметры в используемом наборе схем.

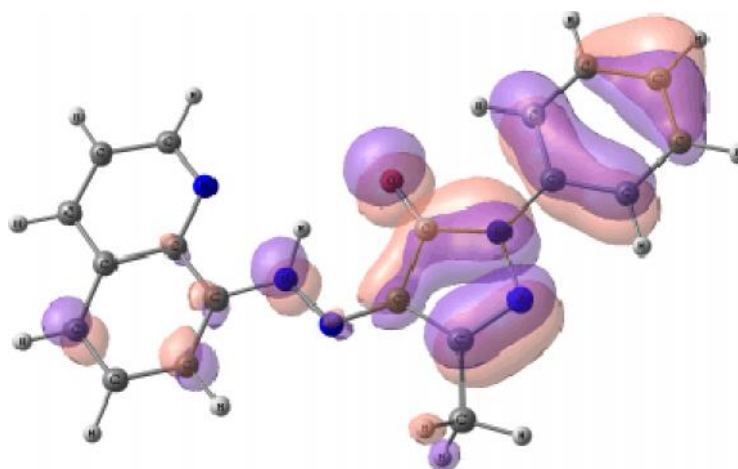
Двойным щелчком мыши на атомах или связях, а также с помощью пунктов меню **View/Labels on atoms** или кнопок ,  и др. можно отображать на атомах и связях различные надписи и изменять стиль этих надписей. Меню **View/Structural parameters** позволяет отобразить на рисунке все длины связей, углов или изменить стиль всех обозначений структурных параметров (в частности, количество цифр после десятичной точки).

Программа позволяет снабдить рисунок вспомогательными обозначениями (надписями, стрелками и др.). Для этого используется панель **Auxiliary designations**, которую можно включить кнопкой  (внизу).

Визуализация молекулярных орбиталей

ChemCraft считывает в расчетном файле таблицу коэффициентов молекулярных орбиталей, по которой можно построить изображения орбиталей в виде изоповерхностей и др. Программа может построить орбитали по выходным файлам **Gaussian/GAMESS**, либо по файлам **Gaussian Checkpoint** (.chk, .fch). Также программа считывает **cube**-файлы с готовыми “кубами”, полученные с помощью утилиты *cubegen.exe* (распространяется вместе с **Gaussian**), либо ADCII TAPE41 – файлы ADF. Для расчетов **Gaussian** нужно во входном файле указать «#P GFINPUT POP(FULL)», чтобы орбитали и описание базисного набора были напечатаны в выходном файле.

Для получения орбиталей нужно открыть расчетный файл и выбрать меню **Tools/Orbitals/Render molecular orbitals**, либо в списке слева выбрать геометрию, к которой в файле приводятся орбитали, и нажать кнопку **Tools** (внизу), далее **Render molecular orbitals**. В появившемся окне нужно поставить галочки на требуемых орбиталях и нажать **OK**. Далее в списке слева следует выбрать молекулярную орбиталь и нажать **Show isosurface** (будет построена изоповерхность с граничным значением, указанным в текстовом окне **Value**) или **Show mapped plane** (будет построена плоскость, раскрашенная цветами от синего до красного в зависимости от значения орбитальной плотности в ее точках, в соответствии с границами, указанными в текстовых окнах **Values range**). Кнопка **Plane position** позволяет изменить положение и ориентацию отображаемой плоскости. Нажатие кнопки **Hide atoms** делает невидимыми атомы и связи, чтобы лучше видеть изоповерхность. Для антисимметричных орбиталей следует при построении изоповерхности нажать кнопку **Both-signed**. Кнопки **Keep this surface** и **Delete all** позволяют получить рисунок с несколькими изоповерхностями. Более подробно о визуализации орбиталей см. файл справки, вызываемый кнопкой **Help** (внизу на панели). На рисунке ниже приведено изображение ВЗМО (высших занятых молекулярных орбиталей) органического лиганда, полученное с помощью программы ChemCraft.



Специальные утилиты

Меню **Tools/Build Z-matrix** позволяет построить Z-матрицу по текущей структуре, щелкая последовательно на атомах, составляющих строки будущей Z-матрицы, и указывая дополнительную информацию (например, является ли параметр двугранным углом или вторым валентным углом). Перед использованием этой возможности необходимо получить структуру молекулы в декартовых координатах. Для этого можно использовать различные средства программы для построения молекул (например, набор молекулярных фрагментов и др.), или, например, провести расчет оптимизации в декартовых координатах на «дешевом» методе. Нужно отметить, что

эта утилита используется для перевода молекулы из декартовых координат в координаты Z-матрицы, а не для построения новой Z-матрицы «с нуля».

Меню **Tools/Create input file/GAMESS-US...** позволяет быстро создать участок входного файла GAMESS-US с нестандартными базисными наборами. Блоки \$DATA, \$ECP создаются на основе описаний базисов в текстовом формате, которые можно получить на странице “PNNL’s Basis Set Order Form” (<http://www.emsl.pnl.gov/forms/basisform.html>).

Chemcraft включает в себя утилиту для сохранения молекулярных орбиталей в текстовом формате, что позволяет использовать орбитали из файла GAMESS/Gaussian как начальное приближение для нового расчета (меню **Tools/Orbitals/Convert orbitals into input format/**).

Chemcraft предоставляет возможность конвертирования дробных (fractional) координат, используемых в кристаллографии, в декартовы, и наоборот (меню **Tools/Crystallography tools**).

Для тех, кто работает с расчетами ЯМР (GIAO, CSGT), может оказаться полезной возможность получения таблицы с величинами химических сдвигов, усредненных по заданным группам атомов. Специальная форма вызывается через меню **Show atomic properties table/**, активируемого кнопкой **Tools** под списком слева.

Пункты меню **Edit/Set point group** позволяют легко придать молекуле требуемую группу симметрии. Это очень полезная утилита, поскольку расчеты симметричных молекул выполняются гораздо быстрее, чем несимметричных.

Дополнительные замечания

Если отображаемая молекула слишком большая и медленно прорисовывается, выберите **Display/Quick**.

Если ChemCraft не определяет правильно связи в молекуле, можно вручную установить все связи с помощью **Ctrl+B** (ни одна связь не должна быть пропущена) и выбрать **Tools/Supporting/Update possible bond lengths table**: тогда в следующий раз программа, вероятнее всего, распознает эти связи правильно.

ChemCraft корректно обрабатывает выходные файлы с незавершенными расчетами (например, неоконченный расчет оптимизации, сканирования). Могут быть открыты выходные файлы, находящиеся в состоянии расчета. Нажатие **Ctrl+R** открывает последний файл заново.

Большинство возможностей программы доступно через пункты главного меню. Каждый раздел меню снабжается описанием, вызываемым через **F1**. Кнопки над изображением молекулы дублируют наиболее часто используемые пункты.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Общие сведения по набору химических структурных формул

Химические структурные формулы, как правило, должны быть набраны шрифтом того же кегля, что и текст, к которому они относятся. Нормальный размер горизонтальных, вертикальных и наклонных знаков связи между символами должен составлять кегль шрифта (более длинные знаки связи, набираемые тонкими линейками, используют в зависимости от особенностей построения формулы). Конфигурация структурных формул (взаимное расположение символов и знаков связи) должна точно соответствовать начертанию этих формул в оригинале, причем должны быть строго выравнены символы и знаки связи по горизонтали и вертикали в рядах формулы. Знаки взаимоотношений и реакций (+, =, →) и др. должны быть отбиты от структурных формул на полукегельную. В формулах химических соединений индексы (число атомов в молекуле) и показатели (расположенные слева от обозначения элемента массовые числа изотопов, знаки зарядов) не должны быть отбиты от предшествующих и последующих частей этой формулы ($\text{CH}_3\text{CH}_2\text{COO}^2\text{H}$).

Если в формуле химического соединения встречаются скобки, то они не должны быть отбиты от предшествующих и последующих элементов формулы ($\text{CH}_3(\text{CC})_3\text{CHCHCOOR}$).

Подписи под формулами химических соединений должны быть набраны отдельными строками шрифтом кегля 6 со строчной буквы, отбиты от формулы на 4 пункта и выключены посередине ее ширины. Если подписи под формулами химических соединений относятся к формулам разной высоты и состоят из разного числа строк, то все подписи должны быть выравнены по верхней строке. Надписи над и под стрелками направления реакции должны быть набраны шрифтом кегля 6 со строчной, выключены посередине стрелки, но от нее не отбиты.

Знаки связи должны быть подключены к символам точно посередине кегля или ширины этого символа без отбивок от него, однако все знаки связи должны быть на зрительно одинаковом расстоянии от видимого изображения символа, поэтому в некоторых случаях, в частности, когда к прописному знаку шрифта кегля 10 подключается знак связи сверху и снизу, может быть дана дополнительная отбивка на 2 пункта.

Знаки связи, примыкающие к замкнутому контуру, должны присоединяться точно к его углам. Знаки двойных и тройных связей должны примыкать к символу всеми своими штрихами. В замкнутых контурах вторые и третьи штрихи таких знаков должны располагаться внутри контура.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

Литвинец Ю.И. Компьютерная химическая графика: учебно-методическое пособие. – Екатеринбург: УГЛТУ, 2009. – 25 с.

Полещук О.Х., Кижнер Д.М. Методические указания к лабораторным работам по компьютерному моделированию химических реакций / под ред. В.Д. Филимонова – Томск: Изд-во ТГПУ, 2007. – 160 с.

Соловьев М.Е., Соловьев М.М. Компьютерная химия. – М.: Солон-Пресс, 2005. – 536 с.

Маркин В.И. Практическое руководство по использованию ChemWindow (версия 6.0): учебное пособие. – Барнаул: Изд-во Алт. ун-та, 2005. – 170 с.

Гиленсон П.Г. Справочник художественного и технического редакторов. – М.: Книга, 1988. – 532 с.

ОГЛАВЛЕНИЕ

ПРЕДИСЛОВИЕ.....	3
1. ПРОГРАММНЫЙ ПАКЕТ ACDLABS.....	4
1.1. Описание программы ACD/ChemSketch.....	4
1.2. Режим редактирования химических формул.....	8
1.3. Режим Draw (Рисование).....	28
1.4. Программа ACD/3D Viewer.....	30
2. РЕДАКТИРОВАНИЕ В ПРОГРАММНОМ ПАКЕТЕ CHEMOFFICE.....	40
2.1. Создание структурных формул в программе ChemDraw	40
2.2. Визуализация молекулярных структур с использованием программы Chem3D пакета ChemOffice.....	48
2.3. Редактирование и анализ геометрии трехмерных моделей молекул ..	58
3. ПРОГРАММА CHEMWINDOW	62
3.1. Общая характеристика редактора ChemWindow	62
3.2. Запуск и рабочее окно программы ChemWindow	63
3.3. Панели инструментов	79
3.4. Изменение структуры молекулы	87
4. ПРОГРАММЫ ISIS/DRAW, SYMYX DRAW, ACCELRYSDRAW	96
4.1. ISIS/Draw	96
4.2. Symyx Draw	98
4.3. Accelrys Draw	104
5. ВИЗУАЛИЗАЦИЯ МОЛЕКУЛЯРНЫХ СТРУКТУР С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ПРОГРАММЫ HYPERCHEM 8.0.....	108
5.1. Создание и редактирование молекулярной модели.....	108
5.2. Атомные характеристики	113
6. ПРОГРАММА CHEMCRAFT.....	115
6.1. Основные возможности программы.....	115
6.2. Работа с молекулярной структурой.....	118
ПРИЛОЖЕНИЕ	122
БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК.....	123

Учебное пособие

Александр Вячеславович Курзин
Лариса Михайловна Попова
Андрей Николаевич Евдокимов

ХИМИЧЕСКИЕ РЕДАКТОРЫ

Учебное пособие

Редактор и корректор Н.П. Новикова

Техн. редактор Л.Я. Титова Темплан 2014 г., поз.125

Подп. к печати 25.11.2014 . Формат 60х84/16. Бумага тип. № 1.

Печать офсетная. Усл. печ.л. 8.0. 8.0 уч.-изд.л. Тираж 100 экз. Изд. № 125.

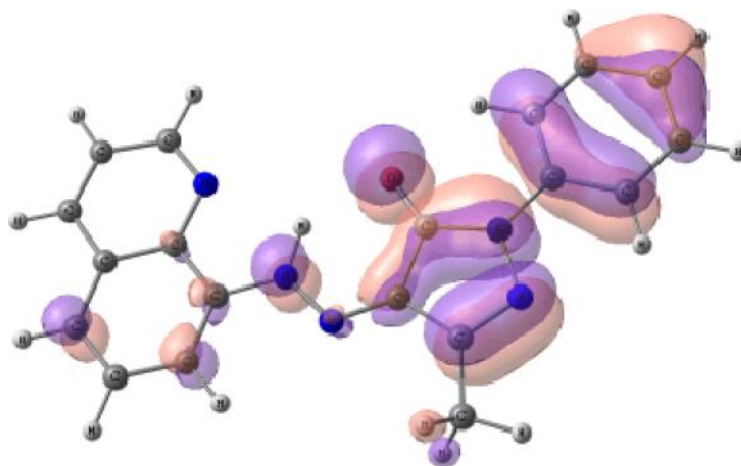
Цена «С». Заказ

Ризограф Санкт-Петербургского государственного технологического
университета растительных полимеров, 198095, СПб, ул. Ивана Черных, 4.

А. В. КУРЗИН, Л. М. ПОПОВА, А. Н. ЕВДОКИМОВ

ХИМИЧЕСКИЕ РЕДАКТОРЫ

УЧЕБНОЕ ПОСОБИЕ



Санкт-Петербург

2014