

Апплет Marvin JS

Структура рабочего окна апплета. Основные кнопки.

Очистить поле для новой структуры

Отменить. Вернуться

Выделить структуру или ее фрагмент

Стереть

Блок химических связей

Изменить заряд атома

Химические связи: одинарная, двойная, тройная

Здесь можно выбрать любой химический элемент

Внести указанный атом. Заменить выделенный атом на данный

Шаблоны структур

Search Type

Назначить поиск по субструктуре

Назначить поиск точно по заданной структуре

Substructure Exact Similarity

Search

Reset

The image shows the Marvin JS chemical structure editor interface. It features a central workspace for drawing and editing chemical structures. On the left, there is a vertical toolbar with various tools for selection, deletion, and drawing. A callout box highlights a sub-toolbar with options for bond types (single, double, triple) and atom types (C, N, O, S, F, P, Cl, Br, I, A). Below the workspace, there are buttons for 'Search Type' (Substructure, Exact, Similarity) and 'Search' and 'Reset' buttons. The interface is annotated with callouts explaining the functions of various tools and buttons.

В большинстве случаев порядок работы таков:

- 1) нажать управляющую кнопку,
- 2) выполнить соответствующее действие в поле апплета.

"Стереть".

Для удаления атома из структуры необходимо щелкнуть по атому.

Для удаления химической связи необходимо щелкнуть по связи.

"Блок химических связей" раскрывается, если щелкнуть по треугольнику на кнопке.

Нам понадобятся кнопки, отображающие одинарную, двойную, тройную связи.

Если одна из этих кнопок нажата, при щелчке по экрану отображается соответствующая связь углерод-углерод.

Для наращивания структуры следует щелкать по нужному атому в структуре.

Для изменения порядка связи в изображенной структуре можно щелкать по связи.

По умолчанию, предполагается, что атом углерода четырехвалентен и к нему присоединено соответствующее число атомов водорода, которые не отображаются на экране.

Связи C-H рисовать не надо — подразумевается, что они есть, но не видны!

"Шаблоны структур" — набор готовых структурных фрагментов.

Если одна из кнопок группы шаблонов нажата, при щелчке по экрану отображается соответствующий цикл.

Наращивание структуры имеет особенности.

Если в имеющейся структуре щелкнуть по первичному атому углерода, цикл встраивается так, что этот атом станет частью цикла.

Если в имеющейся структуре щелкнуть по вторичному или третичному атому углерода, цикл присоединяется к этому атому через связь C-C.

Если в имеющейся структуре щелкнуть по химической связи, цикл встраивается так, что эти два атома станут частью цикла. Так формируют конденсированные циклические структуры.

Атомы

Для замены изображенного атома на атом *иного* химического элемента следует нажать справа кнопку *иного* химического элемента и щелкнуть по нужному атому в структуре.