

ACD/Labs Freeware

Пакет **ACD/Labs Freeware** состоит из двух автономных, но взаимосвязанных программ:

- **ACD/ChemSketch** — молекулярный редактор двумерных химических структур и графический редактор,
- **ACD/3D Viewer** — программа моделирования и визуализации трехмерных структур.

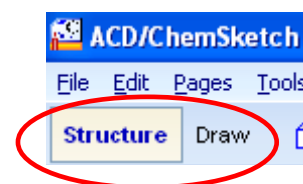
ACD/ChemSketch

Запуск редактора: **Программы -> ACDLABS 12.0 -> ChemSketch**

ChemSketch работает в двух режимах:

- **Structure (Структура)** — молекулярный редактор; изображаемые атомы и химические связи являются элементами химической структуры и имеют соответствующие свойства;
- **Draw (Рисовать)** — графический редактор; все изображаемые элементы являются частями обычного рисунка.

Для переключения между режимами служат кнопки Structure и Draw:

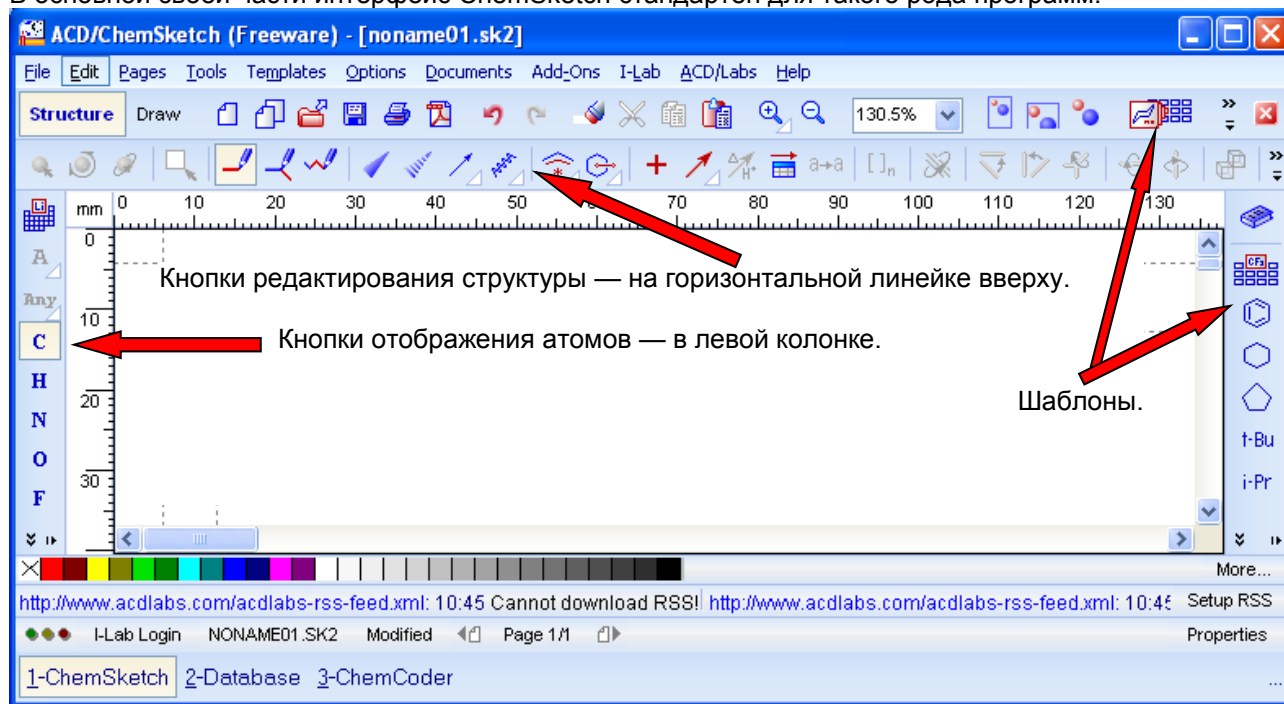


Переключение также происходит при нажатии клавиши "пробел".

Программа по умолчанию загружается в режиме Structure.

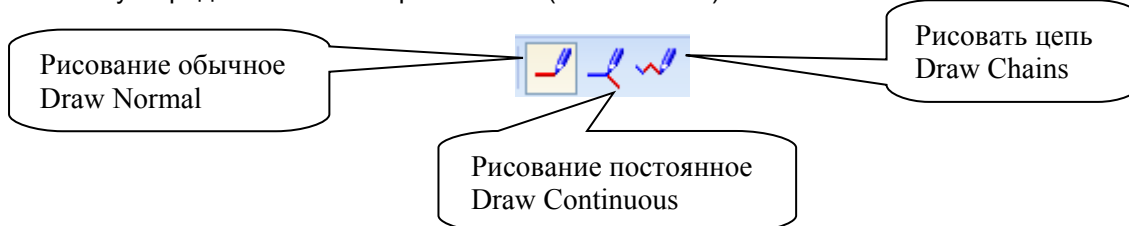
Работа в режиме Structure

В основной своей части интерфейс ChemSketch стандартен для такого рода программ.



При загрузке ChemSketch по умолчанию включаются кнопки:

С "атом углерода" и "Обычное рисование" (Draw Normal)



Выполнение основных операций при нажатой кнопке **Draw Normal**:

- Добавить связь в стандартном направлении — щелкнуть по атому.
- Добавить связь в заданном направлении — щелкнуть по атому и, не отпуская клавишу мышки, передвинуть курсор в нужном направлении.
- Нарисовать связь между имеющимися атомами — щелкнуть по первому атому и, не отпуская клавишу мышки, тянуть связь ко второму атому.
- Изменить порядок связи — щелкнуть по связи.

Действие кнопки **Draw Continuous** аналогичное кроме того, что:

- при первом щелчке по атому атом выделяется, а добавление связи происходит при втором щелчке.

Draw Chains = "Рисовать цепь":

- щелкнуть по атому и тянуть цепь в нужном направлении на нужную длину.



— кнопка "**Периодическая таблица**"

- Если в левой колонке отсутствует кнопка какого-нибудь химического элемента, ее добавляют из Периодической системы.
- Кнопка остается на панели на весь сеанс.
- Чтобы во время сеанса удалить такую кнопку, следует дважды щелкнуть по панели и затем в появившемся окошке подтвердить удаление.

Кнопки выделения.

Программа содержит 4 кнопки для выделения структуры или ее части и последующей манипуляции с выделенным объектом.



При отжатой кнопке "Лассо" выделяется прямоугольник, при нажатой — площадь любой конфигурации.

Особенностью кнопок 2, 3, 4 является то, что процесс проводится в две стадии:

- при выделении объекта в узлах (на атомах, в центрах связей) появляются маленькие белые квадратики,
- для манипуляции с выделенным объектом необходимо установить курсор на любой из этих квадратиков, и если они закрашиваются в черный цвет, можно выполнять соответствующее действие.



Стереть = Delete

Удаление атома или связи:

- Нажать кнопку "Удалить" (обратите внимание, что изменяется форма курсора), затем щелкнуть по атому или связи. Атом удаляется со всеми его связями, причем, если в результате этой операции образовались бы одиночные несвязанные атомы, то они исчезают тоже. Если необходимо удалить только центральный атом, но сохранить периферийные, то удаление проводят при нажатой кнопке **Ctrl**.

Удаление фрагмента или всей структуры:

- Нажать кнопку "Удалить", обвести курсором удаляемую структуру или ее часть. Обведенная курсором структура выделяется — на атомах и связях появляются маленькие квадраты. При наведении курсора на квадрат, он становится активным — закрашивается черным цветом. Если щелкнуть по любому черному квадрату, выделенная структура удаляется.

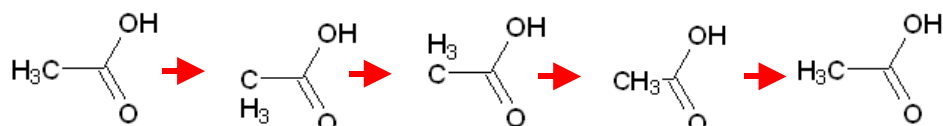


Изменение внешнего вида структуры:



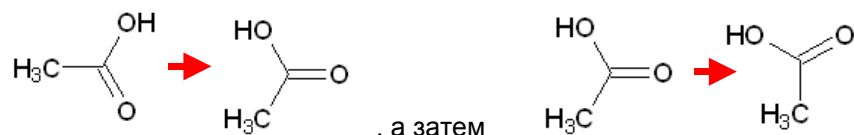
Для изменения положения атомов водорода, для изменения вида двойной связи следует при нажатой кнопке щелкнуть по группе CH_n или по связи.

Упражнение. Проведите следующие преобразования:



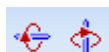
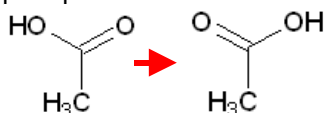
Для разворота структуры в плоскости листа так, чтобы указанная связь оказалась горизонтальной или вертикальной, при нажатой соответствующей кнопке следует щелкнуть по этой связи.

Упражнение. Проведите следующие преобразования:



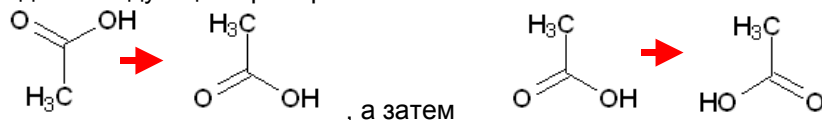
Вращение на 180° вокруг связи — при нажатой кнопке следует щелкнуть по соответствующей связи.

Упражнение. Проведите следующее преобразование:



Вращение на 180° по осям x и y — щелкнуть по одной из этих кнопок.

Упражнение. Проведите следующие преобразования:



"Полимер" — для заключения в скобки звена полимера.

При щелчке по кнопке "Полимер" появляется окошко, в котором следует выбрать параметры:

Index — число полимеризации,

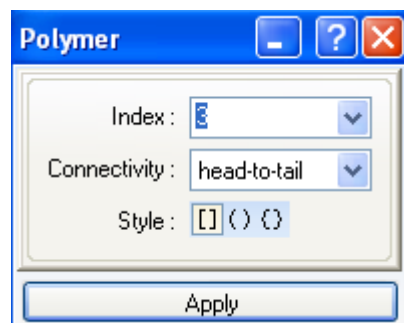
Connectivity — порядок соединения мономерных звеньев:

"голова к хвосту" (head-to-tail),

"голова к голове" (head-to-head),

"любое" (either/unknown).

Style — вид скобок.



После нажатия кнопки *Apply* следует щелкнуть по левой границе звена цепи и, не отпуская клавиши мышки, передвинуть курсор на правую границу звена.

Упражнение. Проведите следующее преобразование:

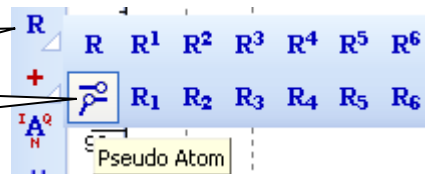


Если при отображении полимера необходимо указать концевую связь без атома, концевой атом заменяют "псевдо-атомом":

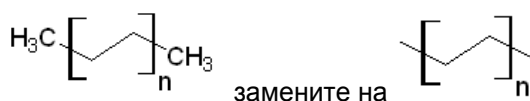
1. В левой колонке щелкнуть по треугольнику кнопки R — открывается список

2. Щелкнуть по кнопке "Псевдо-атом"

3. Щелкнуть в структуре по концевым атомам углерода.



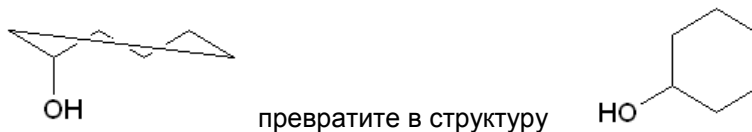
Упражнение:



Подчистка структуры = Clean Structure

Кнопка позволяет "подчистить структуру" — стандартизировать длины связей и углы между связями и сделать ее внешне аккуратной.

Упражнение:



Блок кнопок для написания уравнений химических реакций:

Знак "плюс"



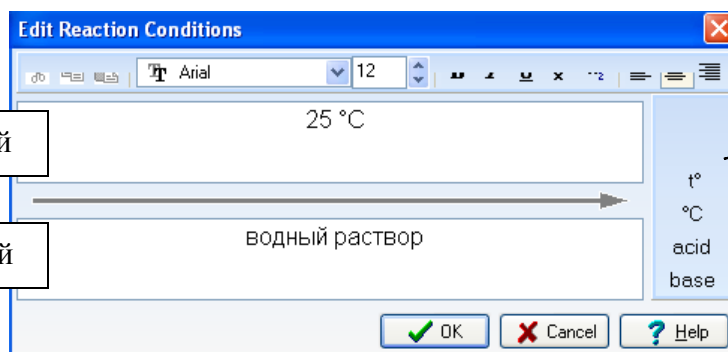
Калькулятор реагентов.

Стрелка между левой и правой частями уравнения

Для написания текста над стрелкой и под стрелкой.
При нажатии открывается окошко:

над стрелкой

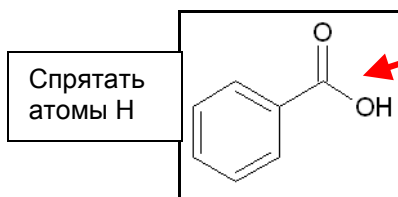
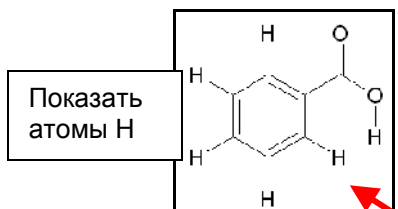
под стрелкой



ГОТОВЫЕ шаблоны

Полезные команды в меню. Раздел **Tools**.

На экране можно показывать или скрывать те атомы водорода, которые насыщают свободные валентности (Explicit Hydrogens).



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

Программа умеет генерировать систематическое название, R/S-стереодескрипторы, коды SMILES и InChI ,

а также генерировать структурные формулы по известным кодам SMILES и InChI .



Кнопка, дублирующая команду Name for Structure



Кнопка, дублирующая команду InChI for Structure

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

Molecular Formula
 Formula Weight
 Composition

Molar Refractivity
 Molar Volume
 Parachor
 Index of Refraction
 Surface Tension
 Density
 Dielectric Constant
 Polarizability
 Monoisotopic Mass
 Nominal Mass
 Average Mass
 M+
 M-
 [M+H]⁺
 [M+H]⁻
 [M-H]⁺
 [M-H]⁻

All Properties

Select Properties to Calculate...
 Selected Properties

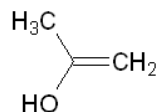
Программа умеет рассчитывать физико-химические параметры вещества.

Еще несколько особенно полезных кнопок



Check for Tautomeric Forms — Генерирование устойчивых таутомерных форм.

Упражнение. Определите, какие таутомерные формы имеются у данной структуры и какая из форм более устойчива:



3D Optimization — Генерирование трехмерной структуры.

Перед началом процесса генерирования программа может спросить, убирать ли атомы водорода (временно). Следует соглашаться — это заметно ускоряет процесс.

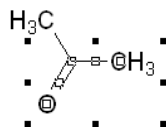
Упражнение. Изобразите двумерную структуру циклогексана и затем сгенерируйте трехмерную его структуру. Вращая структуру в трехмерном пространстве, определите ее конфигурацию: "ванна" или "кресло".



MassSpec Scissors — Расчет молекулярной массы осколков, которые могут образоваться в масс-спектрометрическом эксперименте.

Если выделить фрагмент молекулы и нажать эту кнопку, программа подсчитает молекулярные массы возможных осколков. Эта операция полезна при интерпретации масс-спектра.

Упражнение. Выделите фрагмент молекулы ацетона и посмотрите, как программа прогнозирует появление возможных осколков при масс-спектрометрии.



Calculate LogP — Расчет теоретического значения LogP.

Упражнение. Определите LogP ацетона.



Кнопки для перехода в базы данных PubChem, eMolecules, ChemSpider. Изображенная структура используется как запрос в тех базах данных.

Упражнение. Проведите из ChemSketch поиск в базах данных PubChem, eMolecules, ChemSpider — извлеките информацию об ацетоне.



Кнопка загружает ACD/3D Viewer — программу работы с трехмерными структурами.