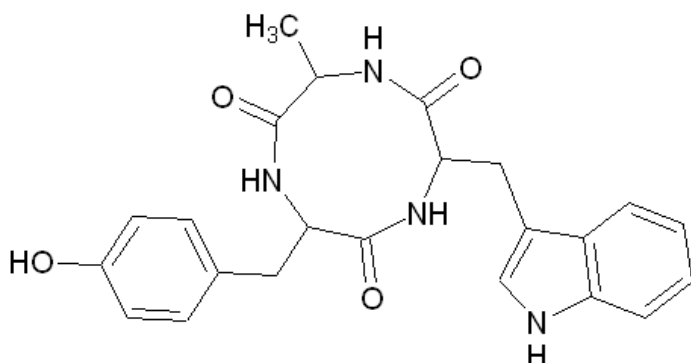


ACD/ChemSketch: режим Structure

Контрольные задания

Контрольное задание 1.

Изобразите на экране следующую структуру, предъявите преподавателю.

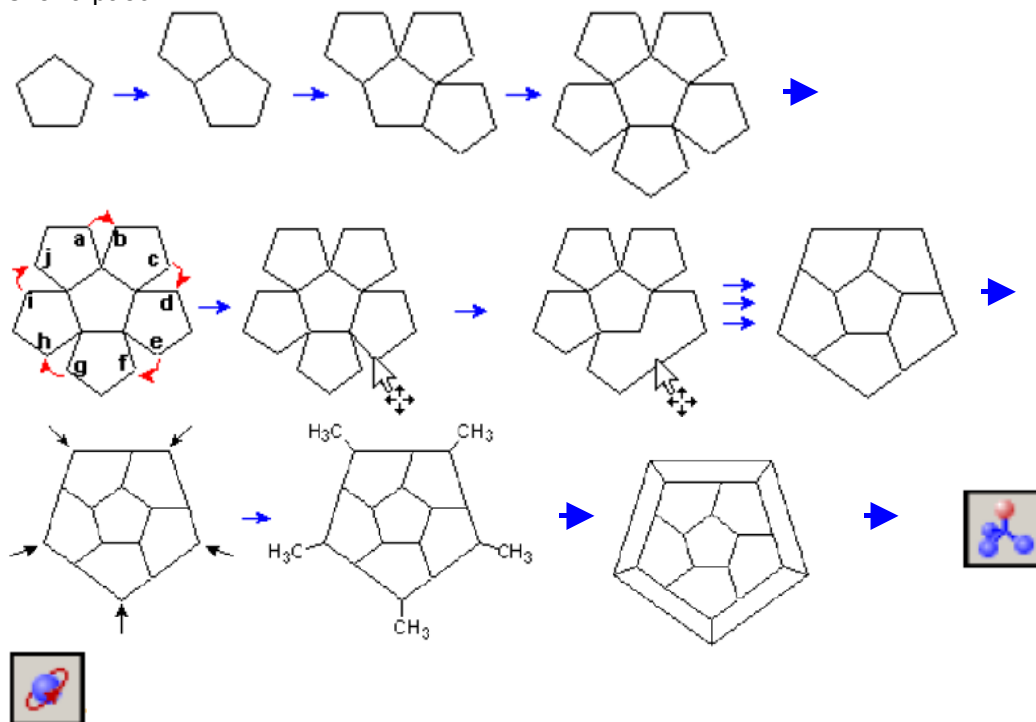


Контрольное задание 2.

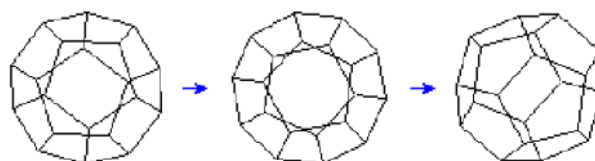
Изобразите структуру [5]фуллерена-C₂₀ — он имеет форму додекаэдра:



Схема работы:



Рассмотрите структуру под разными углами:

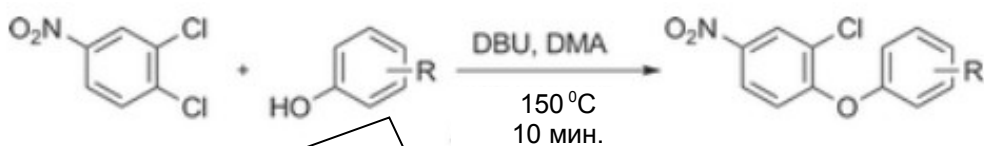


Определите расчетное значение плотности вещества.

Отобразите атомы водорода в явной форме и результат предъявите преподавателю.

Контрольное задание 3.

Изобразите на экране уравнение реакции, предъявите преподавателю.

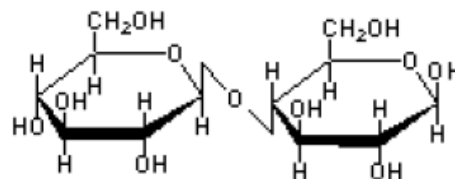


Кстати, а как радикал R присоединен к бензольному кольцу?
Как называется такой тип формул?

Контрольное задание 4.

Изобразите на экране фрагмент структуры β-целлобиозы:

Намек: воспользуйтесь шаблонами (Templates -> Sugars -> ...).



Не забудьте использовать псевдо-атомы на участке

Копирование информации в документ MS Word

Все, что изображено в окне *ChemSketch*, может быть стандартным способом перенесено в документ MS Word:

Копировать -> Вставить (Copy -> Paste) или Ctrl+C -> Ctrl+V.

В результате такой операции в DOC-документе появляется объект программы *ChemSketch*.

При двойном щелчке по объекту открывается *ChemSketch*, объект вносится в исходную программу для редактирования.

Такой метод вставки имеет свои плюсы (возможность редактирования) и минусы (установление связи между программами иногда при некорректных настройках может привести к зависанию компьютера).

Изображенное в *ChemSketch* можно вставить в DOC-документ и как обычный рисунок:

Копировать -> Специальная вставка, Рисунок

Такой путь обеспечивает полную автономию DOC-документа, но исключает возможность эффективного редактирования химической структуры.

Контрольное задание 5.

Изобразите структурную формулу **8-оксихинолина**.

Сгенерируйте его систематическое название, коды SMILES и InChI, величину LogP.

Сгенерируйте расчетные значения физико-химических параметров.

Все результаты перенесите в документ MS Word.

На сайте *ChemSpider* найдите такие же параметры для этого же вещества. Есть ли различия в численных значениях одного и того же параметра, полученного двумя способами?

Найдите экспериментально полученное значение одного из тех параметров, который вы рассчитали теоретически (разрешается любой источник).

Насколько различаются экспериментальное и теоретическое значения?

Результаты внесите в документ MS Word и предъявите преподавателю.