

# КРИВОРІЗЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ ПЕДАГОГІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ

Методичний комплект для виконання лабораторних робіт  
з курсу «Комп'ютерне моделювання хімічних процесів»  
з використанням програми ChemSketch

Кривий Ріг

2018

Методичні рекомендації до лабораторних робіт курсу «Комп'ютерне моделювання хімічних процесів» рекомендовано для студентів, що навчаються за ОКР "бакалавр", природничого напрямку освіти у педагогічних вузах. Представляють собою опис лабораторних робіт з використанням програми ChemSketch, яка є хімічним редактором для створення, редагування, копіювання та збереження структурних формул хімічних речовин. Розглядаються деякі приклади, що дозволяють новачку швидко освоїтися з основами роботи в ChemSketch.

Розробники: Сердюк Н., студентка V курсу групи XI-м-13, Селіванова Т.В к.х.н., доцент кафедри хімії та методики її навчання.

Рецензент: Нечипуренко П.П.

## ЗМІСТ

Вступ.....	4
Лабораторна робота №1. Знайомство з програмою ChemSketch.....	6
Лабораторна робота №2. Знайомство з інтерфейсом програми ChemSketc.....	13
Лабораторна робота № 3. Робота в режимі Structure. ....	22
Лабораторна робота № 3. Робота в режимі Draw.....	24
Література.....	26

## Вступ

**Мета і завдання:** даний методичний посібник спрямований на вироблення у студентів навичок володіння спеціалізованим хімічним програмним забезпеченням, на прикладі програми ChemSketch, і застосування його в навчальній практиці та самостійній роботі.

В результаті освоєння змістовного модуля «Створення структурних формул з використанням програми ChemSketch» дисципліни «Комп'ютерне моделювання хімічних процесів» студенти повинні **володіти професійними компетенціями:**

1. Вміти працювати з комп'ютером на рівні користувача та застосовувати навички роботи з комп'ютерами у соціальній сфері і в області своєї професійної діяльності.
2. Володіти основними методами, способами і засобами отримання, зберігання, обробки інформації, мати навички роботи з комп'ютером як основним засобом управління інформацією.
3. Володіти основами теорії фундаментальних розділів хімії (насамперед неорганічної, аналітичної, органічної, фізичної, хімії високомолекулярних сполук, хімії біологічних об'єктів, хімічної технології)
4. Володіти методами відбору матеріалу для теоретичних занять і лабораторних робіт.
5. Здатність підбору інструментальної бази для вирішення поставлених прикладних завдань.

**В результаті освоєння дисципліни студенти повинні:**

**Знати:** основи створення і редагування структурних формул за допомогою програми ChemSketch.

**Вміти:** використовувати персональний комп'ютер для виконання графічних завдань, моделювати структури молекул.

**Володіти:** програмним забезпеченням для створення структури молекул та їх візуалізації.

**Форми контролю:**

Контроль засвоєння змістовного модулю «Візуалізація молекулярних структур з використанням програми ChemSketch» студентами здійснюється на основі рейтингової системи оцінки якості навчальної діяльності студентів і включає: контроль поточної успішності (відвідування занять і виконання лабораторних робіт) і заключний контроль у вигляді виконання завдань у програмі (самостійної або контрольної).

**ТЕМИ І ЗМІСТ ЛАБОРАТОРНИХ ЗАНЯТЬ**

№	Теми лабораторних робіт	Кількість годин
1.	Знайомство з програмою ChemSketch.	1
2.	Знайомство з інтерфейсом програми ChemSketch	1
3.	Робота в режимі Structure	1
4.	Робота в режимі Draw	1
<b>Всього</b>		<b>4</b>

## Лабораторна робота № 1.

### Знайомство з програмою ChemSketch.

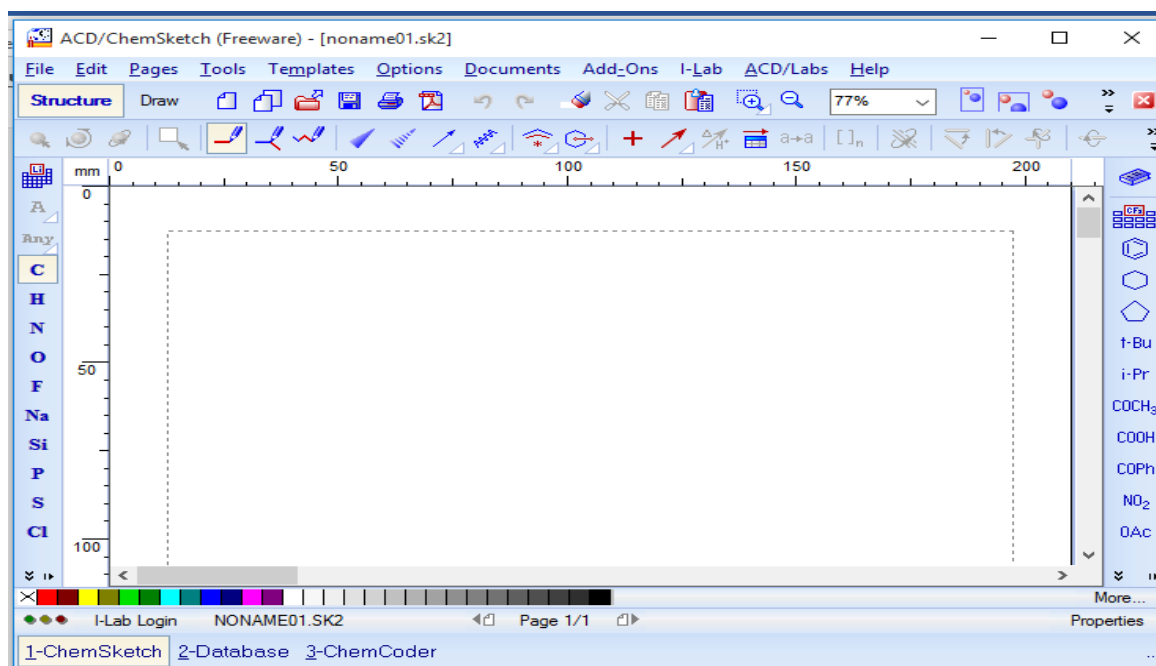
**Мета:** ознайомитися з програмою ChemSketch та виконати завдання.

#### Інструктаж:

1. Правила роботи з комп'ютером та техніка безпеки.
2. Ознайомлення з термінами які використовуються під час роботи з програмою ChemSketch.
3. Огляд робочого вікна програми.
4. Завдання для самостійної роботи.
5. Контрольні питання.

#### Хід роботи:

1. Щоб почати роботу програми, виконайте команду:  
**Пуск → Всі програми → ChemSketch.** Вікно ChemSketch відкривається.

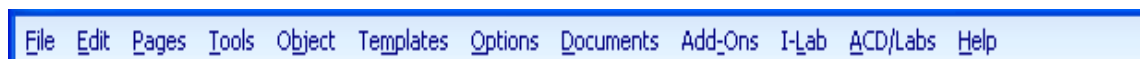


2. Розглянемо частини вікна ChemSketch:

**Рядок назви** показує ім'я файлу з яким ви працюєте.



**Рядок меню** містить назви інших ChemSketch меню:



## ВКЛАДКИ РЯДКА МЕНЮ

Назва вкладки	Переклад
File	Файл
Edit	Редагування
Pages	Сторінки
Tools	Інструменти
Object	Об'єкт
Templates	Шаблони
Documents	Документи
Add-Ons	Надбудови
I-lab	Інтернет база програми
ACD/labs	Завантаження інших програм з пакету ACD
Help	Допомога, підказка

**Пакет ACD/Labs Freeware**

Даний пакет (**ACD/Labs Freeware**) складається з двох автономних але взаємопов'язаних між собою програм:

- ≠ молекулярного редактора двовимірних хімічних структур і графічного редактора - **ACD/ChemSketch**
- ≠ програми моделювання і візуалізації трьохвимірних структур - **ACD/3D Viewer**

**Молекулярний редактор двовимірних хімічних структур і графічний редактор ACD/ChemSketch**

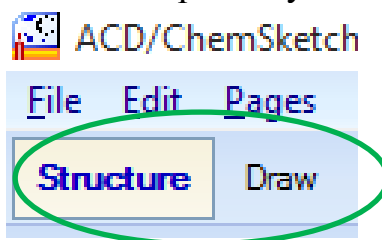
Щоб запустити редактор необхідно виконати наступні команди :

**Всі програми → ACDLABS 12.0 → ChemSketch .**

Програма ChemSketch працює у двох режимах:

- ≠ **Structure** (*Структура*) — молекулярний редактор;
- ≠ **Draw** (*Малювати*) — графічний редактор;

За замовчуванням завантажується програма в режимі Structure. Для перемикання між режимами використовують кнопки Structure і Draw. Також для перемикання режимів можна використовувати клавішу «пробіл».

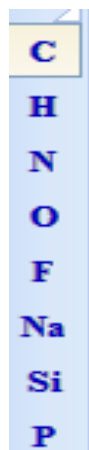
**Робота в режимі Structure**

Інтерфейс програми ChemSketch стандартний як і у всіх подібних програм – редакторів.

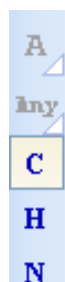
Горизонтальна панель кнопок зверху – кнопки редагування структури.



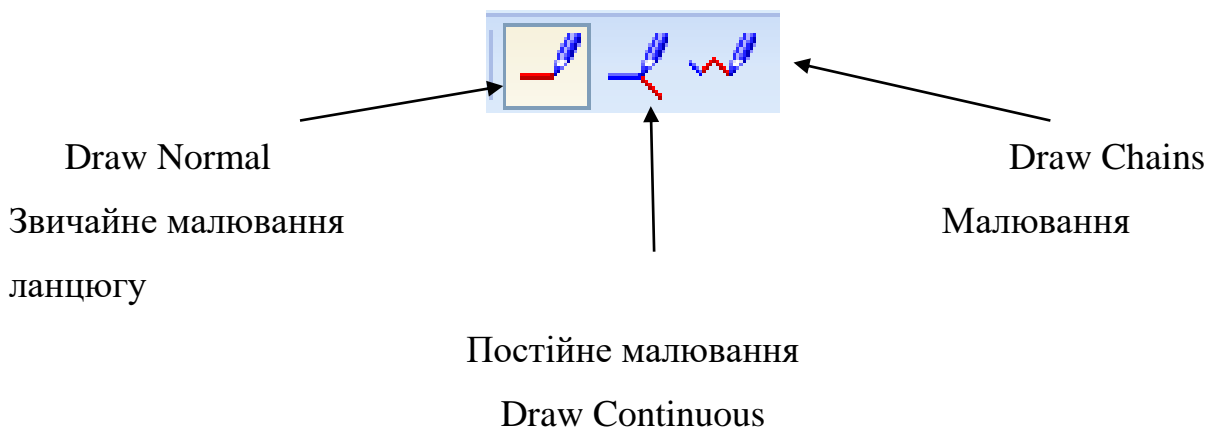
У лівій колонці знаходяться кнопки відображення атомів. Якщо потрібні атоми не відображаються, то їх можна додати з додаткового меню даної панелі.



У лівій колонці знаходяться кнопки шаблонів певних структур.



При завантаженні програми ChemSketch за замовчуванням включаються кнопки на панелях C «атом Карбону» і звичайне малювання (Draw Normal). Кнопки редагування структури на горизонтальній панелі зверху та кнопки відображення атомів у лівій колонці.





При використанні кнопки **Draw Normal** можна виконати наступні операції:

- ≠ Додати зв'язок в стандартному напрямленні (потрібно клацнути по атому);
- ≠ Додати зв'язок в заданому напрямленні (потрібно клацнути по атому, і не відпускаючи клавішу миші пере двинуту курсор у потрібному напрямленні);
- ≠ Намалювати зв'язки між атомами які вже обрані (клацнути по першому атому і не відпускаючи клавішу миші тягнути зв'язок до іншого атома);
- ≠ Змінити порядок зв'язку (для цього клацнути один раз по зв'язку ).

При використанні кнопки **Draw Continuous** можна виконати наступні операції:

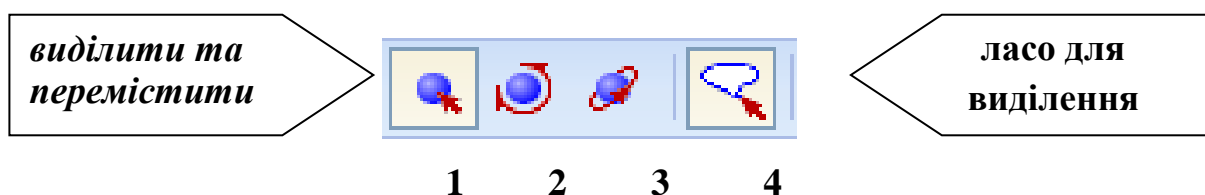
- ≠ Виділити атом (один раз клацнути кнопкою миші)
- ≠ Додавання зв'язку (при другому клацанні кнопкою миші);

При використанні кнопки **Draw Chains** можна виконати наступні операції:

- ≠ Витягнути ланцюг атомів у потрібному напрямленні і на потрібну відстань;
- ≠ Додати хімічний елемент з періодичної системи хімічних елементів(кнопка заданого атому залишається впродовж всього сеансу);

Програма ChemSketch в режимі Structure містить 4 кнопки для виділення структури або її частини для того, щоб далі маніпулювати виділеним об'єктом або його частиною.

#### *Кнопки виділення*





Виділити об'єкт / Змінити розмір об'єкту / Обертати об'єкт



виділити об'єкт і обертати у двохвимірному просторі

Особливості кнопок 2,3,4 полягає в тому що процеси використання відбуваються у дві стадії: при виділенні об'єкта в вузах з'являються маленькі білі квадратики; для маніпуляції з виділеним об'єктом необхідно встановити курсор на будь який з цих квадратиків, і якщо вони зафарбувалися у чорний колір, то можна приступати до виконання відповідних дій.

### Кнопки зміни зовнішнього вигляду структури



Для зміни положення атомів Гідрогену, для зміни подвійного зв'язку (слід при нажатій клавіші клацати по групі  $\text{CH}_n$  або по зв'язку )



для розвертання структури в площині листа, для розміщення її вертикально або горизонтально (при нажатій клавіші слід клацнути по цьому зв'язку);



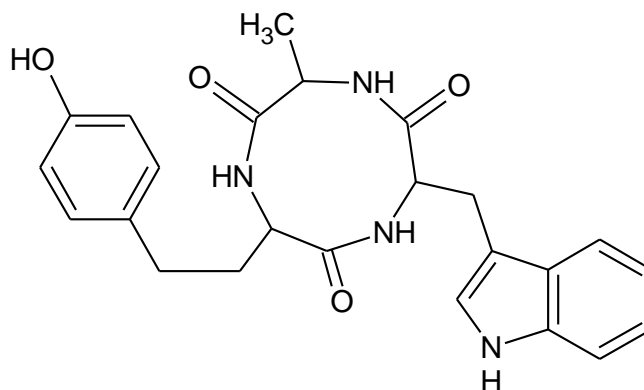
обертання на  $180^\circ$  навколо зв'язку (при нажатій клавіші слід клацнути по відповідному зв'язку )



обертання на  $180^\circ$  навколо вісі x та y.

### Завдання для самостійної роботи.

№1 Створіть на екрані наступну структуру:



№2 Створіть на екрані формулу фулерена  $\text{C}_{20}$  (додекаедр) [].

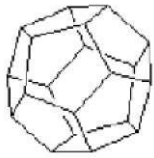
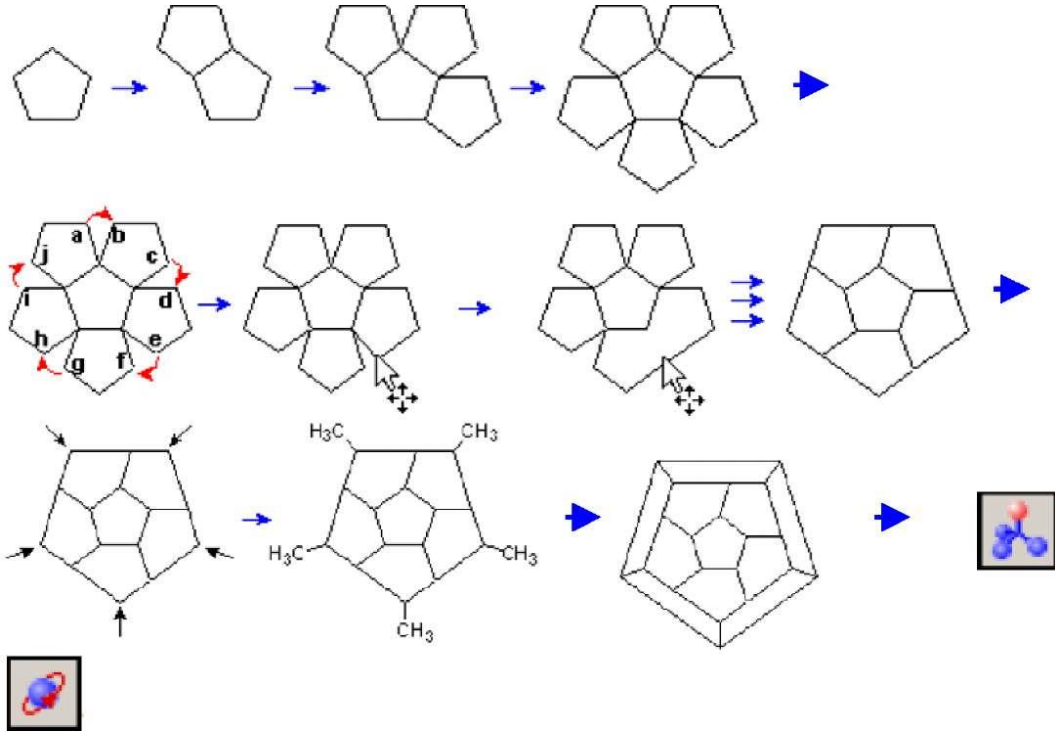
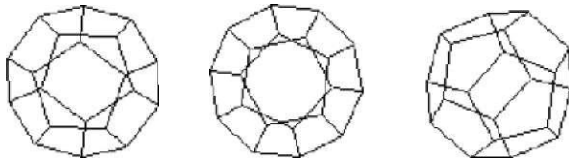


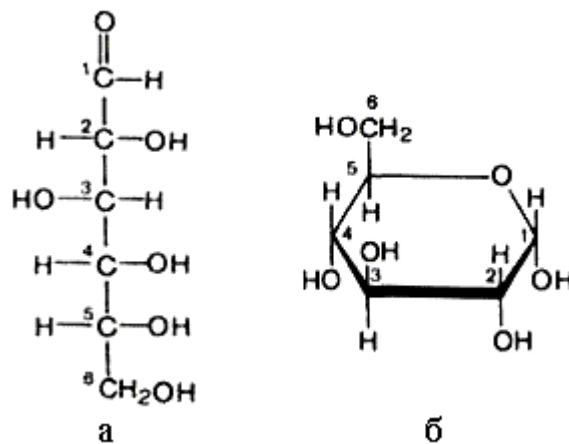
Схема виконання завдання:



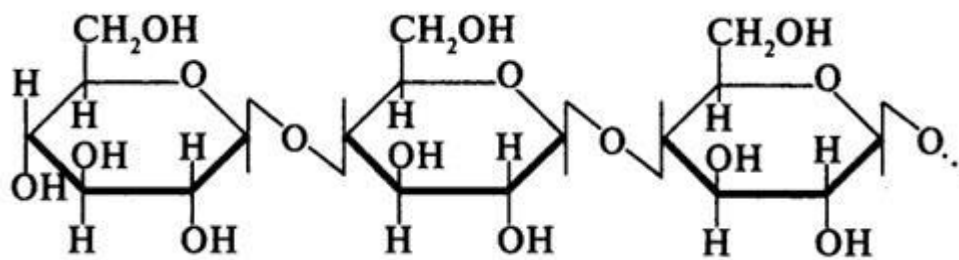
Розгляньте фігуру під різними кутами. Відобразіть атоми Гідрогена.



№3 Створіть на екрані формули  $\alpha$ -D-глюкози:




№4 Створіть на екрані фрагмент формули целюлози



### Копіювання інформації в документ MS Word

Все що зображено у вікні ChemSketch може бути стандартним шляхом перенесено в документ MS Word:

Виділити () → Копіювати → Вставити (copy → paste) або Ctrl+C → Ctrl+V

Утворені формули можна вставити в документ і як звичайний малюнок:

Копіювати → Спеціальна вставка → Малюнок

№5 Створіть формулу 8-оксихіноліну. Згенеруйте його систематичну назву.

Перенесіть в документ MS Word.

#### Контрольні питання:

1. В яких режимах працює програма ChemSketch?
2. Де знаходяться атоми, якщо вони не відображаються на панелі з лівого боку?
3. Які Ви знаєте кнопки в режимі звичайного малювання?
4. Чи можна вставляти структурні формули речовин в інші програми? Як це зробити?

## Лабораторна робота №2

### Знайомство з інтерфейсом програми ChemSketch

**Мета:** ознайомитися з інтерфейсом програми ChemSketch, її можливостями та виконати завдання.

#### Інструктаж:

1. Правила роботи з комп'ютером та техніка безпеки.
2. Огляд інтерфейсу програми ChemSketch.
3. Завдання для самостійної роботи.
4. Контрольні питання.

#### Хід роботи:

#### Робота в режимі Structure

В основній своїй частині інтерфейс ChemSketch стандартний для такого роду програм.

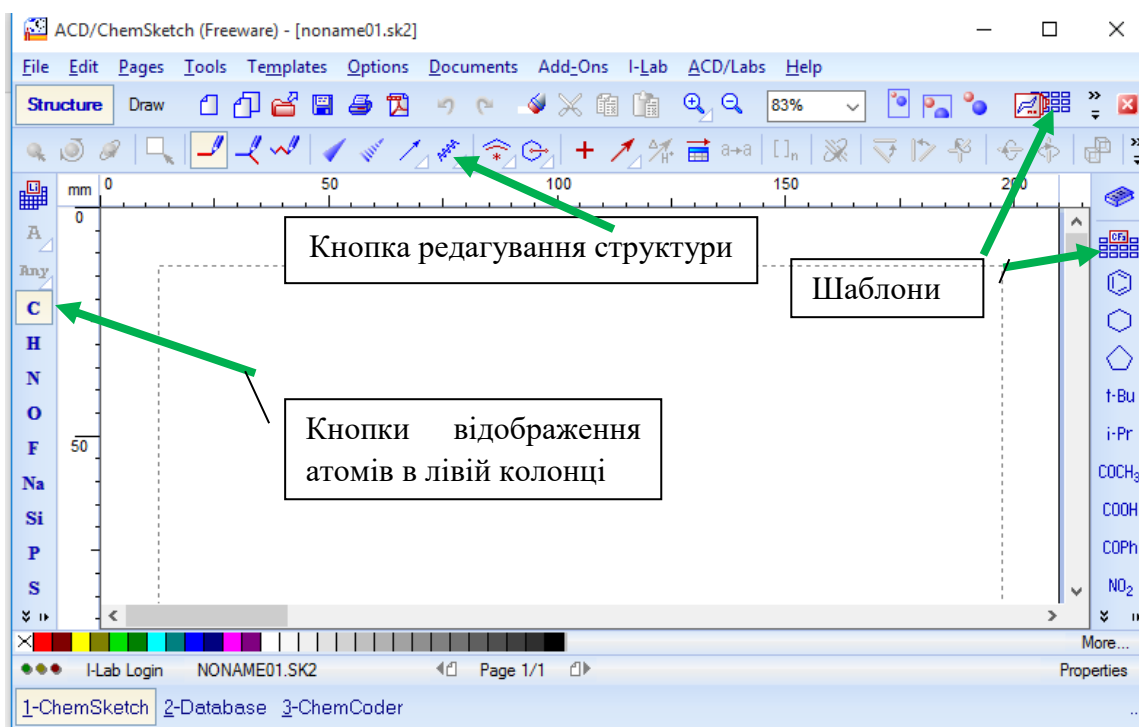
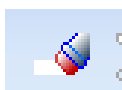


Рис.1.3. Вікно програми ChemSketch в режимі Structure



- Стерти – Delete (видалення атома або зв'язку):



"Полімер" - для укладання в дужки ланки полімеру. При натисканні на кнопку "Полімер" з'являється віконце, в якому слід вибрати параметри:

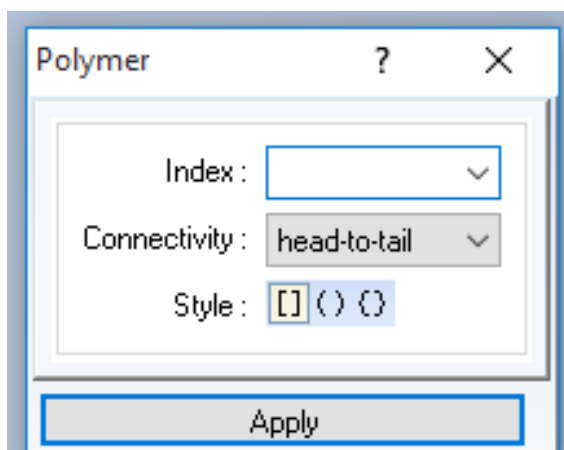



Рис.1.7. Вікно кнопки «Полімер»

Index - число полімеризації,  
Connectivity - порядок з'єднання  
мономерних ланок:

- "Голова до хвоста" (head-to-tail),
- "Голова до голови" (head-to-head),
- "Будь-яке" (either / unknown).

Style - вид дужок.

Після натискання кнопки «Apply» слід клацнути по лівій межі ланки ланцюга і, не відпускаючи клавіші мишки, пересунути курсор на праву межу ланки.

 - підчистка структури - Clean Structure: кнопка дозволяє "підчистити структуру" - стандартизувати довжини зв'язків і кути між зв'язками і зробити її зовні акуратною.

### Блок кнопок для написання рівнянь хімічних реакцій

Знак «плюс»

Калькулятор реагентів

Стрілка між правою та лівою частинами рівняння

Для написання тексту над стрілкою та під стрілкою. При натисканні відкривається вікно

Над стрілкою

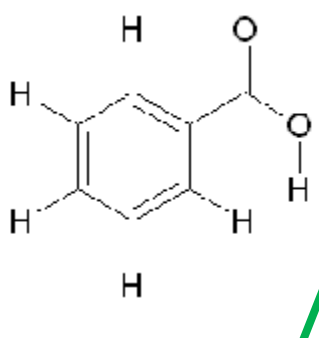
Під стрілкою

Готові шаблони

## Корисні команди в меню. Розділ Tools.

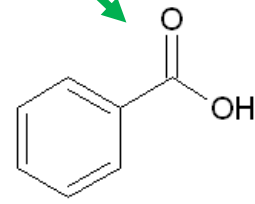
На екрані можна показувати або приховувати ті атоми водню, які насичують вільні валентності (Explicit Hydrogens).

Показувати атоми  
водню



Tools	Templates	Options	Documents	Add-Or
Structure Properties				Alt+Shift+S
Clean Structure				F9
Check Automeric 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				▶

Не показувати  
атомів водню



Name for Structure Ctrl+Shift+I

Stereo Descriptors

Stereo Descriptors Options...

SMILES Notation

Structure from SMILES

InChI for Structure

InChI Options...

Structure from InChI

програма вміє  
розраховувати  
фізико-хімічні  
параметри  
речовини.

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...

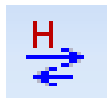
Selected Properties

програма вміє генерувати систематичну назву, R/S-стереодискриптори, коди SMILES і InChI, а також генерувати структурні формули за відомими кодами SMILES і InChI.

Ще декілька корисних кнопок:



- кнопка, що дублює команду Name for Structure



- Check for Tautomeric Forms - генерування стійких таутомерних форм.



- 3D Optimization - Генерування тривимірної структури. Перед початком процесу генерування програма може запитати, чи слід прибрати атоми водню (тимчасово). Слід погоджуватися - це помітно прискорює процес.



- MassSpec Scissors – розрахунок молекулярної маси осколків, які можуть утворитися в маспектрометричному експерименті.

Якщо виділити фрагмент молекули і натиснути цю кнопку, програма підрахує молекулярні маси можливих осколків. Ця операція корисна при інтерпретації маспектра.



- Calculate LogP - Розрахунок теоретичного значення LogP.



- Кнопки для переходу в БД PubChem, eMolecules, ChemSpider. Зображена структура використовується як запит в тих БД.



- кнопка завантажує ACD/3D Viewer - програму роботи з тривимірними структурами.

### Робота в режимі Draw



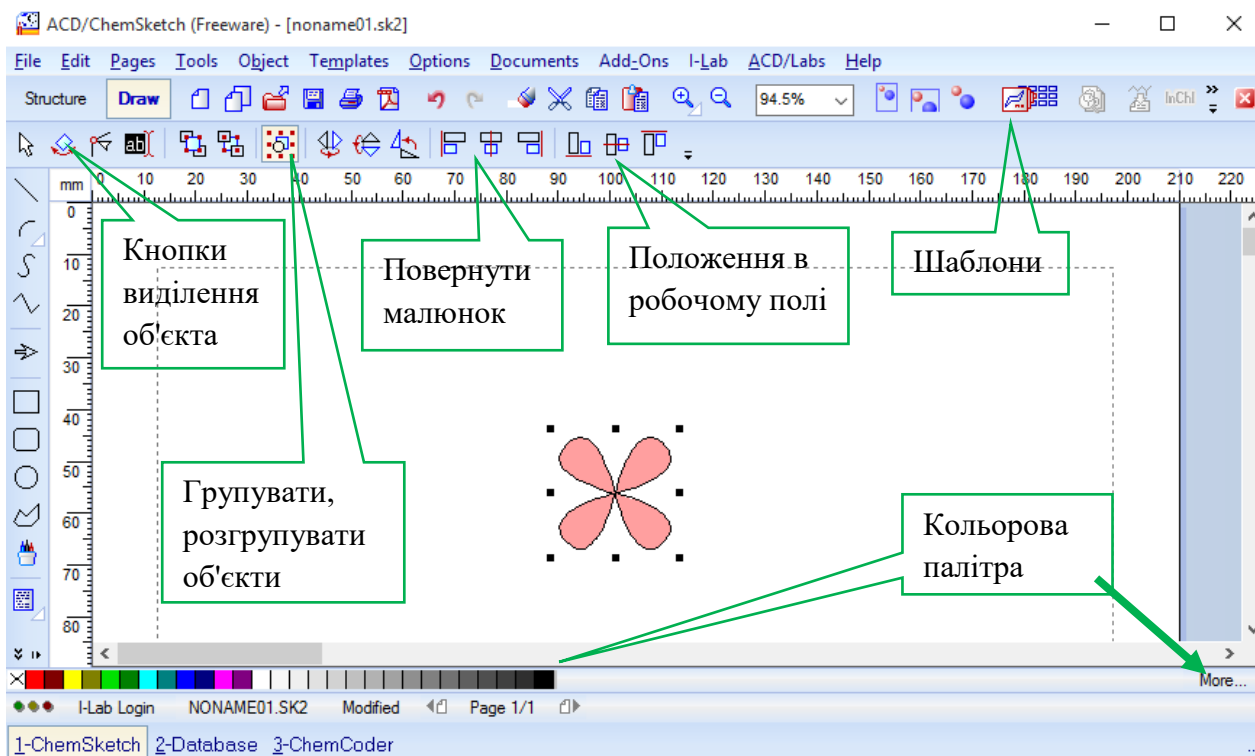


Рис.1.8. Вікно програми ChemSketch в режимі Draw

У лівій колонці розміщені кнопки з функціями, звичайними для графічних редакторів.



- кнопка для малювання ламаних кривих.

Клацнути на початку лінії, перенести курсор і далі в точках перелому слід зробити клацання лівою клавiшею мишки, в кінцевій точці - клацання правою клавiшею.

У горизонтальному ряду зверху знаходяться кнопки управління, в тому числі:



- виділити, перемістити, змінити розмір.



- Виділити, обернути на площині листа.

Виділення декількох об'єктів - утримуючи клавiшу Shift.

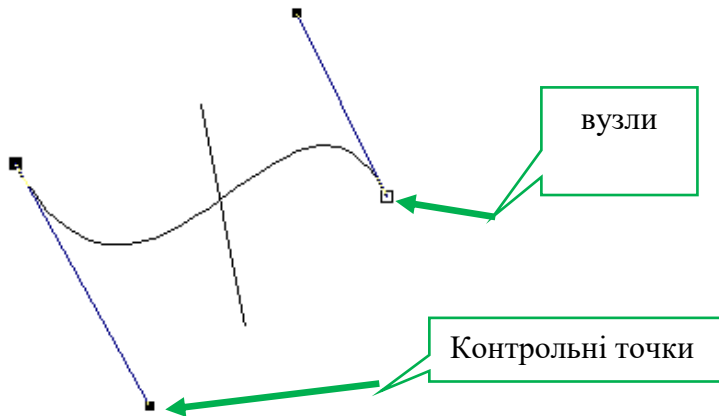
Виділення всіх об'єктів - Ctrl + A.




- кнопка для переміщення вузлів і контрольних точок кривих і ламаних ліній.

Вузли - кінці сегментів кривих або відрізків прямих. При натисканні на вузол з'являється відрізок дотичної з розташованими на ньому контрольними точками.

Переміщаючи контрольну точку, змінюють кут нахилу кривої.



При активації кнопки  на панелі з'являються додаткові кнопки, призначені для редагування ліній, що мають вузли:



- з'єднати прямою лінією кінцеві вузли виділеної кривої,



- видалити сегмент між виділеними вузлами,



- додати сегмент між виділеними вузлами,



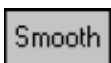
- видалити виділені вузли,



- перетворити виділену криву або сегмент в пряму,



- перетворити виділену пряму в криву,



- згладити лінію в точці перелому,



- зробити два сегмента симетричними щодо вузла.



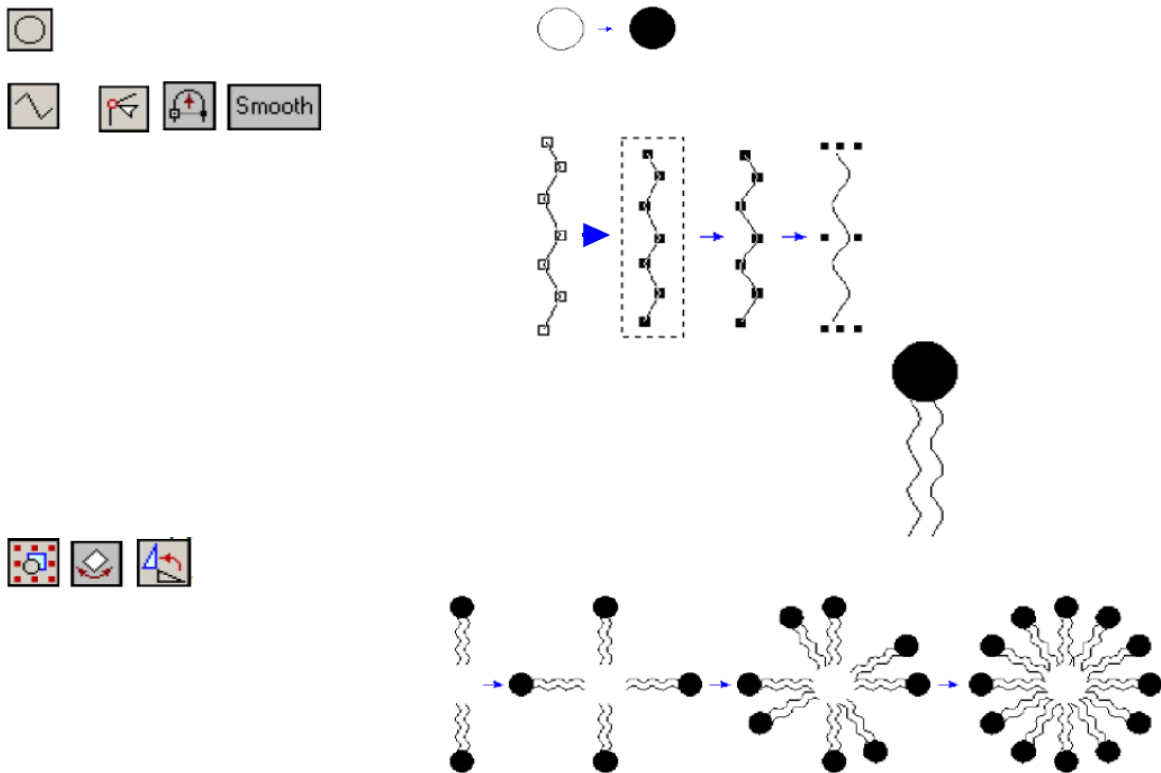
- друкувати і редагувати текст.

## Завдання для самостійної роботи.

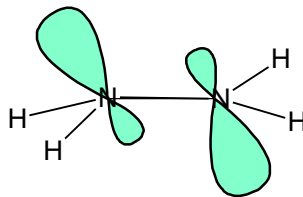
№1. Зобразить міцелу:



Схема роботи:

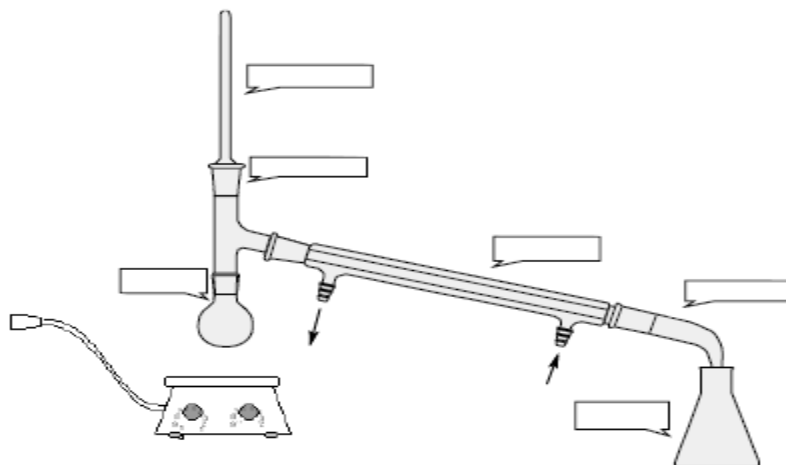


№2. Створити будову молекули гідразина:

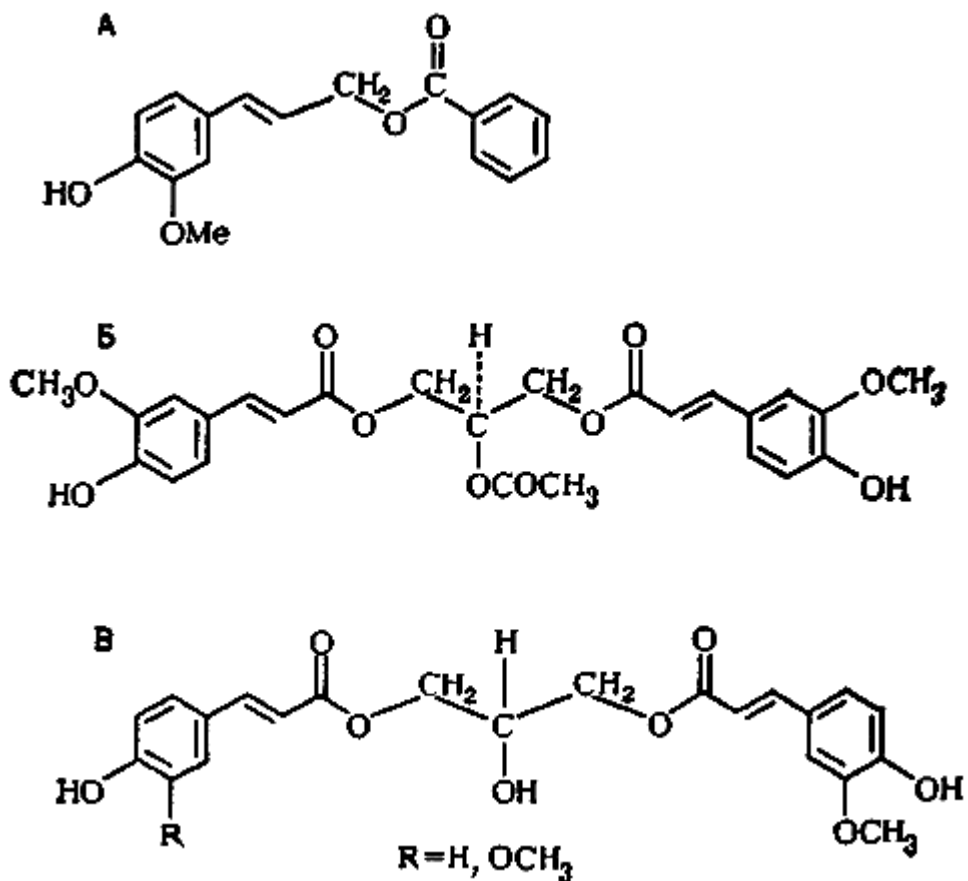


Формулу набрати в режимі структура, орбіталі намалювати в режимі малювання.

№3. Зібрати і зобразити наступний прибор:



№4. Використовуючи програму ASD/ ChemSketch створіть наступні формули:



№5. За допомогою програми ChemSketch визначити, чи існують таутомерні структури наступних речовин:

Аденін, тимін, урацил, фолієва кислота, аскорбінова кислота.

*Контрольні питання:*

1. Які можливості режиму роботи Structure програми ChemSketch?
2. Які можливості режиму роботи Draw програми ChemSketch?
3. Які фізико-хімічні параметри можна розрахувати за допомогою даної програми?

## *Лабораторна робота №3*

### *Робота в режимі Structure*

**Мета:** вдосконалення навичок роботи в режимі Structure, виконуючи завдання.

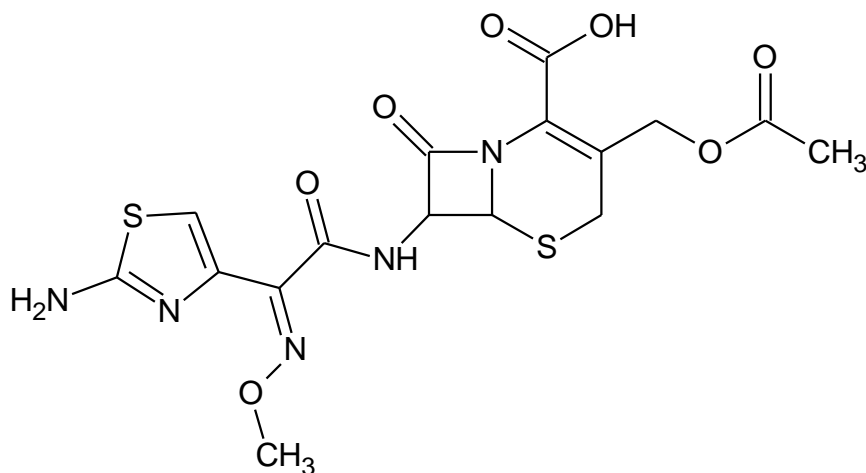
#### *Інструктаж:*

1. Правила роботи з комп'ютером та техніка безпеки.
2. Повторення теоретичного матеріалу щодо можливостей в режимі Structure програми ChemSketch.
3. Завдання для самостійної роботи.
4. Контрольні питання.

#### *Хід роботи:*

##### *Завдання для самостійної роботи.*

**№1.** Побудувати структурну формулу антибіотика цефотаксима. Провести автонумерацію атомів. За допомогою програми ChemSketch визначити і записати назву антибіотика у відповідності міжнародної номенклатури ІЮПАК

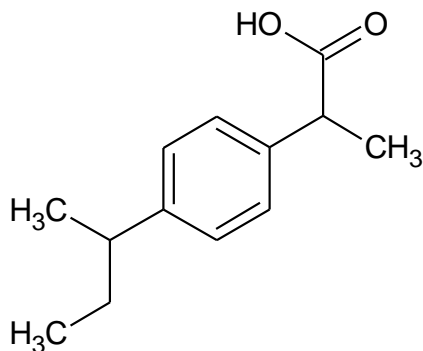


**№2.** Створити структурні формули таких речовин: аспірин, рибофлавін.

Виконати з ними такі дії:

- ✓ згенерувати їх систематичну назву.
- ✓ згенерувати код InChi;
- ✓ згенерувати код SMILES;

**№3.** Створити подану структурну формулу речовини:



Дати назву, оптимізувати її запис за допомогою відповідного інструменту та розрахувати хімічні властивості для даної речовини.

*Контрольні питання:*

1. Назвіть основні елементи вікна програми ChemSketch в режимі Structure.
2. Опишіть призначення кнопки MassSpec Scissors.
3. Перечисліть всі види генерування структурних формул речовин.

## Лабораторна робота №4

### Робота в режимі Draw

**Мета:** вдосконалення навичок роботи в режимі Draw, виконуючи завдання.

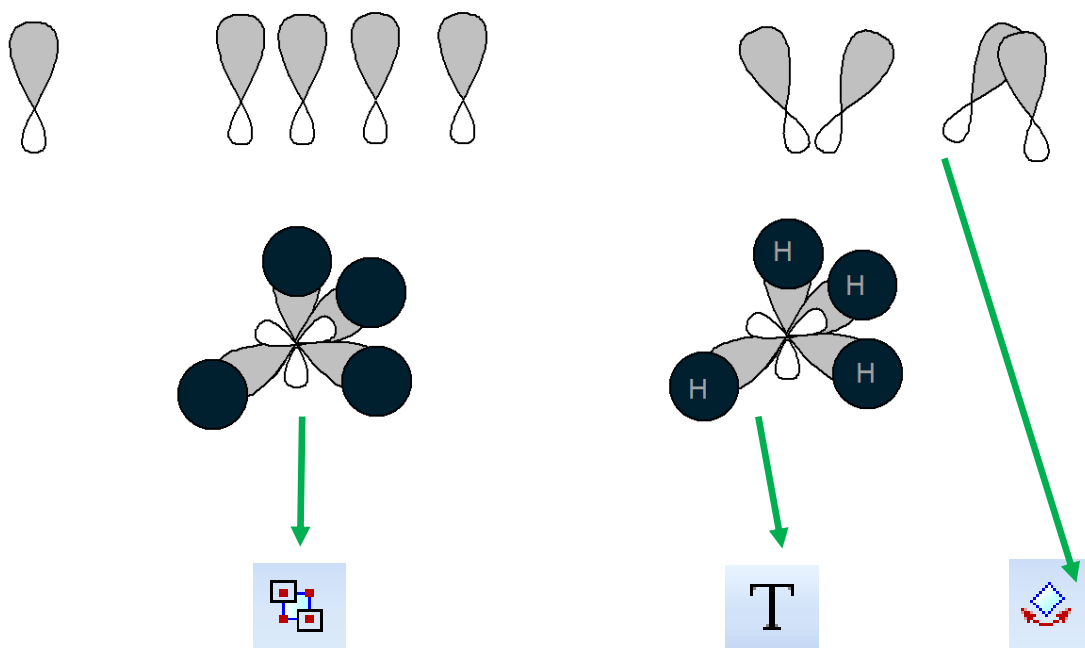
#### Інструктаж:

1. Правила роботи з комп'ютером та техніка безпеки.
2. Повторення теоретичного матеріалу щодо можливостей в режимі Draw програми ChemSketch.
3. Завдання для самостійної роботи.
4. Контрольні питання.

#### Хід роботи:

#### Завдання для самостійної роботи.

**№1.** Побудувати модель молекули, що подана нижче



**№2.** Намалювати таблицю та заповнити її. Таблиця буде мати такі колонки:

- назва хімічної речовини (пропонує викладач)
- структурна формула;
- фізико-хімічні параметри речовини

**№3.** Створити схематичне зображення графіка залежності від температури розчинності у воді аміаку.



*Контрольні питання:*

1. Назвіть основні елементи вікна програми ChemSketch в режимі Draw.
2. На Вашу думку, чи існують вагомні недоліки в режимі Draw?
3. Чим відрізняється режим Structure від режиму Draw?

## Література:

1. ACD/ChemSketch [електронний ресурс] // Режим доступу: [https://eduinf.waw.pl/che/inne/prgchem/pages/chsk\\_eng.pdf](https://eduinf.waw.pl/che/inne/prgchem/pages/chsk_eng.pdf)
2. ACD/Labs [Електронний ресурс]. — Режим доступу: <http://www.acdlabs.com>.
3. ACD/Labs Freeware [електронний ресурс] // Режим доступу: <http://www.abc.chemistry.bsu.by/structure/8-acdlabs-1.pdf>
4. Підгорна Т.В. Вивчення хімічних редакторів у школі [Текст] / Т.В. Підгорна // Комп'ютер у школі та сім'ї. – 2015. – № 7. – С. 3–8.
5. Підгорна Т.В. Інформаційно-комунікаційні технології в хімічних дослідженнях: Посібник для вчителів — К.: Видавництво НПУ імені М.П. Драгоманова, 2013. — 233 с.