

Наумова Е.Р.

*Научный руководитель: старший преподаватель Е.В. Шаранова
Муромский институт (филиал) федерального государственного образовательного
учреждения высшего образования «Владимирский государственный университет
имени Александра Григорьевича и Николая Григорьевича Столетовых»
602264, г. Муром, Владимирская обл., ул. Орловская, 23
katienaumova27@gmail.com*

Формирование умения визуализации химических структур

Компьютерная химия — сравнительно молодая область химии, возникшая на стыке химии и компьютерных технологий.

В компьютерной химии применяют различные формы информационного сопровождения. Наиболее простым и эффективным приемом является использование готовых программных продуктов. Среди них большой популярностью пользуется пакет программ ACD/LabsFreeware.

Пакет программ ACD/LabsFreeware состоит из двух автономных, но взаимосвязанных программ:

- ChemSketch — молекулярный редактор двумерных химических структур и графический редактор;

- 3D Viewer — программа моделирования и визуализации трехмерных структур.

Программа 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).

Функционал программы ChemSketch в режиме Structure позволяет:

- изображать различные связи между атомами с помощью кнопок;
- содержит кнопки для выделения структуры или ее части и последующей манипуляции с выделенным объектом;

- содержит кнопки изменения внешнего вида структуры вещества (различные повороты);

- в программе есть возможность построения структуры полимера и выделения его звена;

- позволяет стандартизировать длины связей и углы между связями в молекулярной структуре, сделать ее внешне аккуратной;

- имеется блок кнопок для написания уравнений химических реакций;

- в программе есть возможность показывать или скрывать атомы водорода;

- программа рассчитывает различные физико-химические параметры вещества;

- генерирует коды SMILES и InChI;

- позволяет сделать генерацию трехмерной структуры;

- предоставляет возможность поиска в базах данных PubChem, eMolecules, ChemSpider.

Функционал программы ChemSketch в режиме Draw позволяет:

- нарисовать линию, дугу и другие графические элементы, для изображения которых предназначены кнопки левой колонки редактора;

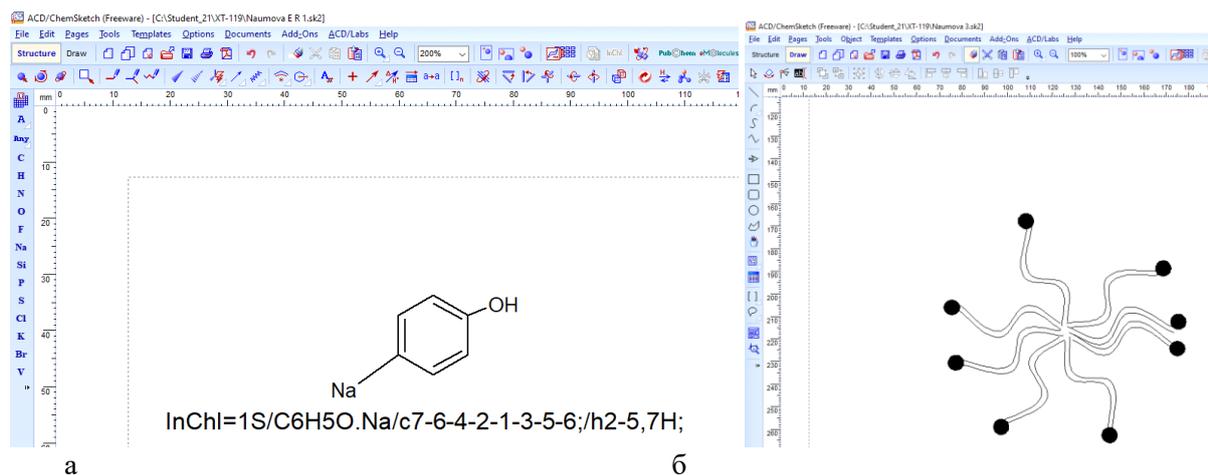
- уменьшить размер всех элементов в 2 раза;

- изменить цвет нарисованных вами объектов;

- подписать все объекты с помощью кнопки «Edit text»;

- позволяет нарисовать различные приборы, используя шаблоны.

На рисунке 1 представлены примеры использования программы ChemSketch в режимах Structure (а) и Draw (б).



а б
Рис. 1. Примеры использования программы ChemSketch в режимах Structure (а) и Draw (б)

Функционал программы 3D Viewer позволяет:

- изменить тип структуры, в том числе, отображения ван-дер-ваальсовой поверхности;
- имеются кнопки управления: выделение, вращение, перемещение структур;
- имеются кнопки измерения межъядерных расстояний, валентных и двугранных углов.

На рисунке 2 представлен пример структуры в программы 3D Viewer.

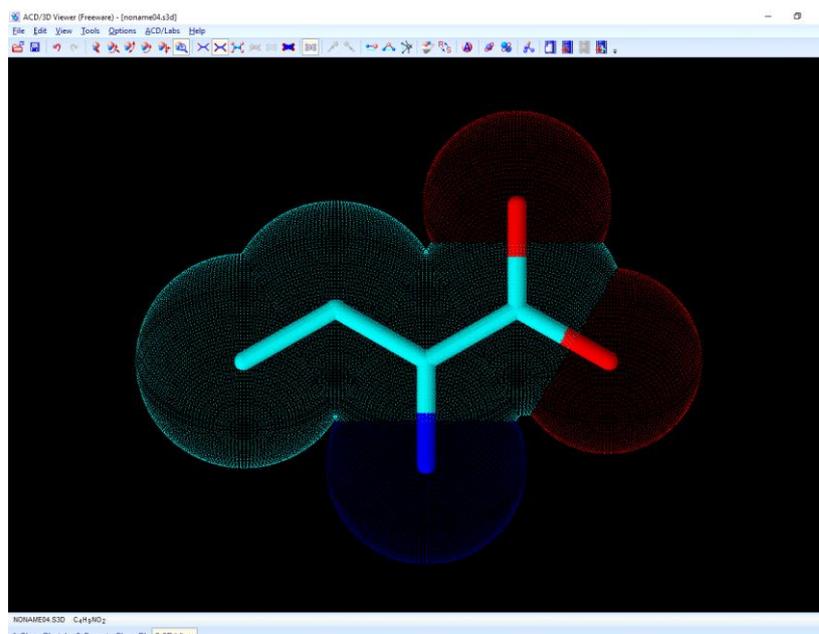


Рис.2. Пример структуры в программы 3D Viewer

Таким образом, я рассмотрела пакет программ ACD/LabsFreeware, который состоит из двух взаимосвязанных программ ChemSketch и 3D Viewer. Они позволяют нам выполнить множество различных функций: создание и редактирование химических структур и оборудования, автоматическое именование структур и перевод из названия в структуру, вычисление молекулярных свойств по химической структуре, возможность использования InChI и SMILES, а также программа имеет шаблоны химических структур и оборудования.

Литература

1. Компьютерная химия: методические указания К 59/ сост. Д. А. Базлов, В. Ю. Орлов, А. Д. Котов, А. В. Цивов; Ярослав. гос. ун-т им. П. Г. Демидова. — Ярославль ЯрГУ, 2013 — 76 с.
2. Использование методов компьютерной химии в преподавании химических дисциплин. А.Б. Нурушаева. cyberleninka.ru.