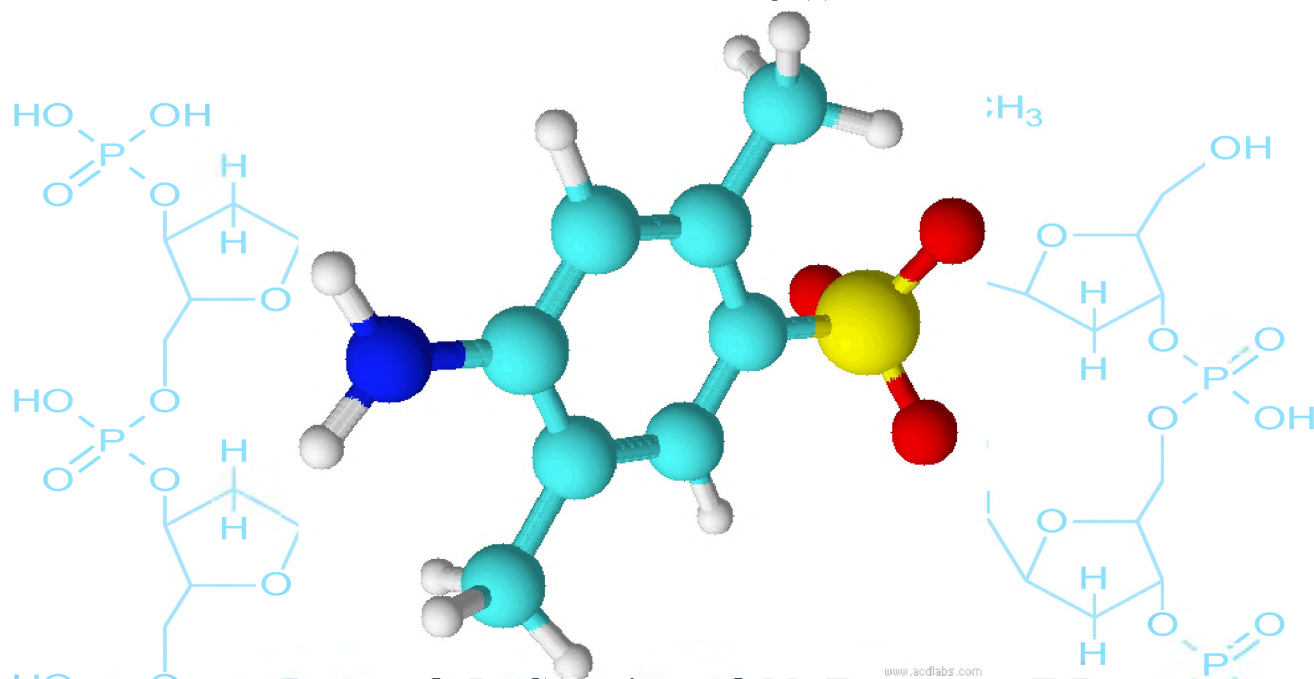


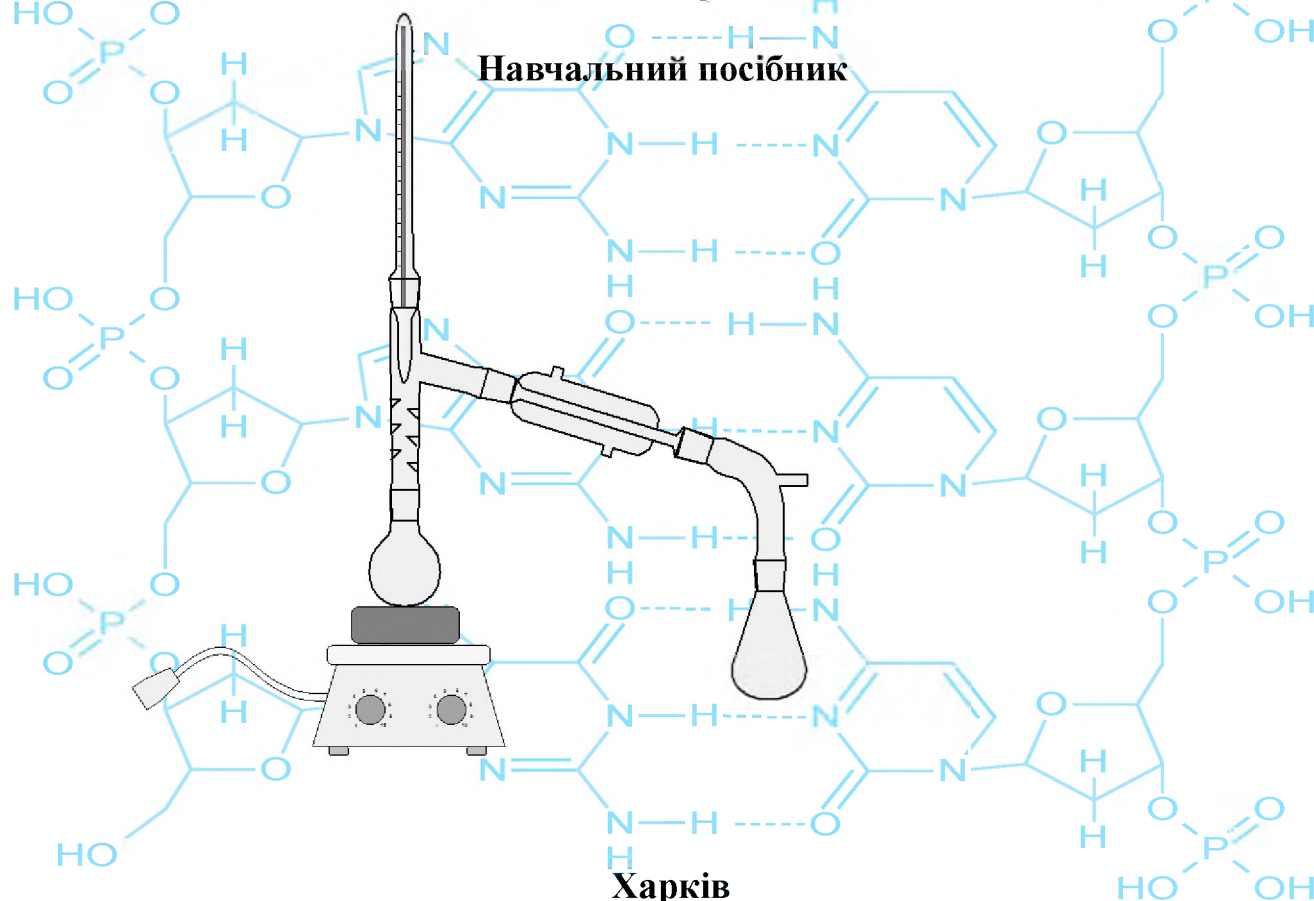
Міністерство освіти і науки України  
Харківський національний педагогічний університет  
імені Г.С.Сковороди



Винник О.Ф., Свєчнікова О.М., Грановська Т.Я.

Застосування програмного засобу  
ACD/ChemSketch (Freeware) 12.0  
для написання хімічних формул та моделювання  
хімічних процесів

Навчальний посібник



Харків  
2018

УДК 547(07)  
ББК 24.я73

Рецензенти:

**Колісник С.В.** – доктор фармацевтичних наук, професор кафедри аналітичної хімії Національного фармацевтичного університету;

**Панайотова Т.Д.** – кандидат хімічних наук, завідувач кафедри хімії Харківського національного університету міського господарства імені О.М.Бекетова

Затверджено редакційно-видавничою радою Харківського національного педагогічного університету імені Г.С.Сковороди

протокол №      від

**Винник О.Ф., Свєчнікова О.М., Грановська Т.Я.**

Застосування програмного засобу ACD/ChemSketch (Freeware) 12.0 для написання хімічних формул та моделювання хімічних процесів. Навчальний посібник. – Харків, 2018. – 92с.

У посібнику описано використання програмного засобу ACD/ChemSketch (Freeware) 12.0: його інсталяція, інтерфейс та основи роботи, налаштування, описано роботу з базами даних хімічних структур та об'єктів, моделювання молекулярних структур, визначення геометричних параметрів молекул. Наведені численні приклади застосування ChemSketch: написання формул ди- та олігосахаридів, полісахаридів, ди- та олігопептидів, вітамінів, полімерів, координаційних сполук, стереоізомерів, іонів та радикалів; рівнянь реакцій; відображення механізмів реакцій. Кожен розділ супроводжується завданнями для самоконтролю.

Видання призначене для студентів та аспірантів природничих спеціальностей педагогічних вузів. Може бути рекомендовано для вчителів природничих дисциплін та учнів.

Електронний посібник для студентів природничих факультетів педагогічних вишів, вчителів природничих наук та учнів.

© Харківський національний педагогічний університет імені Г.С.Сковороди

© Винник О.Ф., Свєчнікова О.М., Грановська Т.Я.

## ЗМІСТ

<b>ВСТУП.....</b>	<b>6</b>
<b>1. ІНСТАЛЯЦІЯ.....</b>	<b>7</b>
<b>2. ОСНОВИ РОБОТИ В РЕДАКТОРІ CHEMSKETCH .....</b>	<b>12</b>
2.1. ПЕРШИЙ ЗАПУСК .....	12
2.2. ОСНОВНІ ПАНЕЛІ .....	13
2.3. ЗАВДАННЯ ДЛЯ САМОКОНТРОЛЮ: .....	20
<b>3. СТИЛІ.....</b>	<b>21</b>
3.1. ВЛАШТОВАНІ СТИЛІ.....	21
3.2. НАЛАШТУВАННЯ СТИЛЮ ЗА ЗАМОВЧУВАННЯМ. ПАНЕЛЬ „PROPERTIES” .....	22
3.2.1. Панель „Properties” вкладка „Common” .....	22
3.2.2. Панель „Properties” (“Властивості”) вкладка „Atom ” (“Атом”) .....	25
3.2.3. Панель „Properties” вкладка „Bond” („Зв’язок”) .....	29
3.2.4. Панель „Properties” вкладка „Special ” („Спеціальні ”) .....	34
3.3. СТВОРЕННЯ СТИЛІВ КОРИСТУВАЧА.....	35
<b>4. ПАНЕЛЬ „PREFERENCES ” („НАДАВАТИ ПЕРЕВАГУ ”) ТА ІНШІ НАЛАШТУВАННЯ.....</b>	<b>36</b>
4.1. ПАНЕЛЬ „PREFERENCES” ВКЛАДКА „GENERAL” .....	36
4.2. ПАНЕЛЬ „PREFERENCES” ВКЛАДКА „STRUCTURE” .....	38
4.3. ПАНЕЛЬ „PREFERENCES” ВКЛАДКА „REACTION” .....	40
4.4. ПАНЕЛЬ „PREFERENCES” ВКЛАДКА „CLEAN” .....	41
<b>5. ЗАСТОСУВАННЯ ВІКНА “TEMPLATE WINDOW ” (“ВІКНО ШАБЛОНІВ” ) ДЛЯ ШВИДКОГО НАБОРУ ФОРМУЛ .....</b>	<b>42</b>
5.1. ЗАСТОСУВАННЯ БАЗ ГОТОВИХ ОБ’ЄКТІВ ДЛЯ ШВИДКОГО НАБОРУ ФОРМУЛ.....	42
5.2. СТВОРЕННЯ ВЛАСНИХ БАЗ ГОТОВИХ ОБ’ЄКТІВ (TEMPLATE ORGANIZER) .....	45
5.3.ЗАВДАННЯ ДЛЯ САМОКОНТРОЛЮ .....	46
<b>6. ЗАСТОСУВАННЯ CHEMBASIC ДЛЯ ШВИДКОГО НАБОРУ ФОРМУЛ .....</b>	<b>47</b>
6.1. НАЛАШТУВАННЯ ПАНЕЛІ CHEMBASIC .....	47
6.2. НАБІР ФОРМУЛ ПОЛІПЕПТИДІВ.....	47
6.3. НАБІР ФОРМУЛ ДНК ТА РНК .....	51
<b>7. ЗАСТОСУВАННЯ ACD/3D VIEWER.....</b>	<b>53</b>
7.1. ЗАСТОСУВАННЯ ACD/3D VIEWER ДЛЯ ДЕМОНСТРАЦІЇ МОЛЕКУЛЯРНИХ СТРУКТУР .....	53
7.2. ЗАСТОСУВАННЯ ACD/3D VIEWER ДЛЯ ВИЗНАЧЕННЯ ГЕОМЕТРИЧНИХ	

	4
ПАРАМЕТРІВ МОЛЕКУЛ .....	56
7.3. СТВОРЕННЯ АНІМАЦІЙ.....	58
7.4. ЗАВДАННЯ ДЛЯ САМОКОНТРОЛЮ .....	60
<b>8. ПРИКЛАДИ ЗАСТОСУВАННЯ CHEMSKETCH .....</b>	<b>61</b>
8.1. НАПИСАННЯ ФОРМУЛ ДИ- ТА ОЛІГОСАХАРИДІВ .....	61
8.2. НАПИСАННЯ ФОРМУЛ ДИ- ТА ОЛІГОПЕПТИДІВ.....	64
8.2.1. Застосування вікна шаблонів для написання формул ди- та олігопептидів .....	64
8.2.2. Завдання для самоконтролю .....	65
8.3. НАПИСАННЯ ФОРМУЛ ВІТАМІНІВ .....	65
8.3.1. Застосування вікна шаблонів для написання формул вітамінів.....	65
8.3.2. Завдання для самоконтролю .....	65
8.4. НАПИСАННЯ ФОРМУЛ ПОЛІМЕРІВ .....	65
8.4.1. НАПИСАННЯ ФОРМУЛ ПОЛІСАХАРИДІВ.....	65
8.4.2. Завдання для самоконтролю .....	67
8.5. НАПИСАННЯ ФОРМУЛ КООРДИНАЦІЙНИХ СПОЛУК .....	67
8.5.1. Застосування інструменту “Coordinating [Arrow] Bonds” для написання формул сполук з координаційними зв’язками.....	67
8.5.2. Завдання для самоконтролю .....	68
8.6. НАПИСАННЯ ФОРМУЛ СТЕРЕОІЗОМЕРІВ .....	68
8.6.1. Застосування інструментів „Up Stereo Bonds” та „Down Stereo Bonds” .....	68
8.6.2. Визначення параметрів стереоізомерів .....	70
8.6.3. Завдання для самоконтролю .....	72
8.7. НАПИСАННЯ ФОРМУЛ ІОНІВ ТА РАДИКАЛІВ .....	72
8.7.1. Застосування інструментів „Increment (+) Charge” та „Decrement (-) Charge” для написання формул іонів.....	72
8.7.2. Застосування інструментів „Radical”, “Positive Radical Ion” “Negative Radical Ion” для написання формул радикалів.....	73
8.6.3. Завдання для самоконтролю .....	74
8.8. НАПИСАННЯ РІВНЯНЬ РЕАКЦІЙ.....	74
8.8.1. Основні інструменти для роботи із рівняннями реакцій .....	74
8.8.2. Застосування хімічного калькулятора (калькулятора реакцій) .....	75
8.8.3. Завдання для самоконтролю .....	77
8.9. ТЕКСТОВІ НАДПИСИ.....	78
8.10. ЗАСТОСУВАННЯ CHEMSKETCH ДЛЯ ВІДОБРАЖЕННЯ МЕХАНІЗМІВ РЕАКЦІЙ .....	78
8.10.1. Зображення делокалізованого зв’язку в неароматичних сполуках .....	78
8.10.2. Зображення формул ароматичних сполук.....	78
8.10.3. Зображення ароматичних іонів з делокалізованим зв’язком .....	79



8.10.4. Зображення індуктивного та мезомерного ефектів у формулах речовин .....	80
8.10.5. Ручна нумерація атомів .....	82
8.10.6. Відображення ізотопного складу та валентності атома .....	82
8.10.7. Карта реакції .....	83
8.10.8. Завдання для самоконтролю .....	85
<b>ЛІТЕРАТУРА .....</b>	<b>86</b>
<b>ПРЕДМЕТНИЙ ВКАЗІВНИК.....</b>	<b>87</b>

## Вступ

Сучасний педагог повинен володіти комп'ютерними технологіями. Використання різноманітних програмних засобів дозволяє вчителю створити цікаві та якісні уроки. Крім того, в сучасному світі переважна кількість інформації представляється в електронному вигляді, тому підготовка вчителя хімії потребує гарних навичок цифрового зображення хімічних формул, рівнянь реакцій, хімічних процесів. Найбільш розповсюджений текстовий редактор Word не містить модулів для набору хімічного тексту, тому написання (особливо комплексних та органічних сполук), тим більше у 3D форматі завжди викликає певні утруднення.

У процесі розвитку ІТ технологій було створено ряд редакторів хімічного тексту. Найбільш популярність серед хіміків-науковців набули ChemWindow, ChemDraw, HyperChem, MarvinSketch тощо. Одним із розповсюджених редакторів є ChemSketch, який на відміну від вище наведених є безкоштовним, потужним, зручним у використанні, універсальним, інтегрований до Word. ACD/ChemSketch 12 дозволяє записувати різноманітні формули неорганічних та органічних сполук, моделює хімічні структури, розрахувати деякі фізико-хімічні параметри, зображати лабораторний посуд та обладнання, створювати 2D та 3D формули стереоізомерів, зберігати зображення в різних форматах. Редактор містить досить об'ємну бібліотеку вже готових формул та рисунків, яка може доповнюватися користувачем. Тому цей програмний засіб ширше використовується як серед науковців, студентів, так і вчителів хімії, учнів.

Підручників або посібників на українській мові по застосуванню цього програмного засобу немає.

Цей посібник безперечно може бути корисним для широкого кола користувачів: студентів та аспірантів хімічних і біологічних спеціальностей, викладачів, вчителів природничих дисциплін, учнів.

## 1. Інсталяція

Програмний засіб (ACD/ChemSketch (Freeware)) створено компанією Advanced Chemistry Development, Inc. (ACD/Labs). Розміщено на сайті компанії <http://www.acdlabs.com/resources/freeware>, є повністю безкоштовним.

Програмний засіб ACD/ChemSketch (Freeware) складається з трьох взаємопов'язаних автономних програм:

- ACD/ChemSketch – редактор для роботи з формулами та малюнками.
- ACD/3D Viewer – програма для моделювання та візуалізації молекулярних структур.
- ACD/ChemBasic – спеціалізована мова програмування.

Для інсталяції необхідно завантажити файл „chemsk12.exe” із сайту <http://www.acdlabs.com/resources/freeware/chemsketch>. Потім необхідно запустити файл інсталяції. Відкривається вікно (рис.1.1):

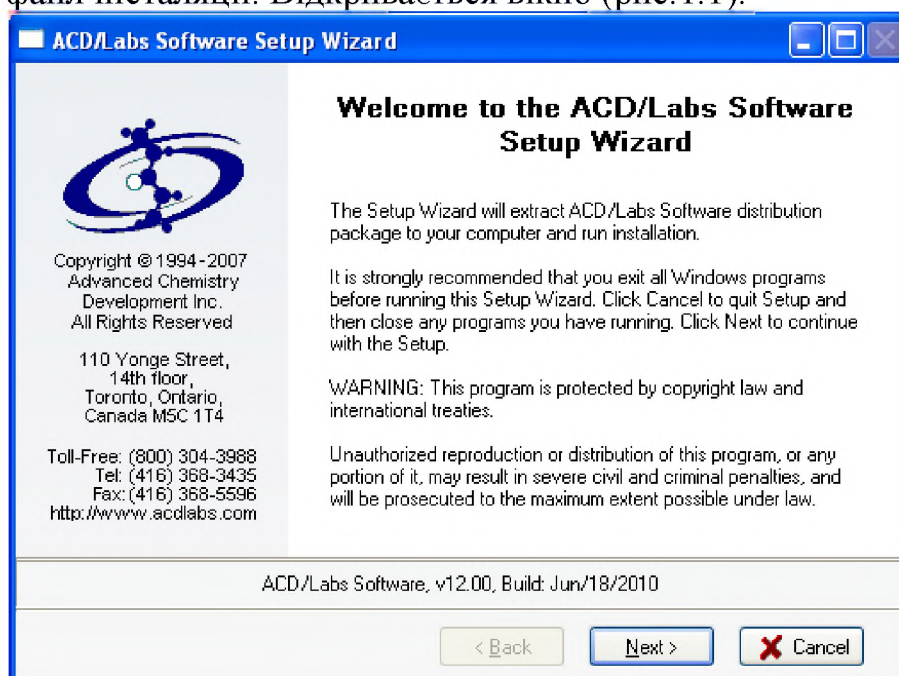


Рис. 1.1. Початок інсталяції ACD/ChemSketch (Freeware)

Після натискання на кнопку „Next” з’явиться вікно ліцензійних домовленостей (рис.1.2.). Виберіть опцію “I accept the term in License Agreement” та натисніть кнопку „Next”. З’явиться вікно вибору програмних засобів (рис.1.3). В цьому вікні можна відібрати основні програмні засоби необхідні користувачеві. Якщо ви детально не ознайомлені з їх призначенням, виберіть все (“All”). Для цього не обов’язково натискати кнопку „Select All”, оскільки за замовчуванням інсталиються всі програми пакету, просто натисніть кнопку „Next”. Далі відкривається вікно вибору папки для кнопки „Пуск” Windows (рис.1.4). Залиште запропонований варіант та натисніть кнопку „Next”. Після цього з’явиться меню вибору для інсталяції додаткових компонентів (рис.1.5).

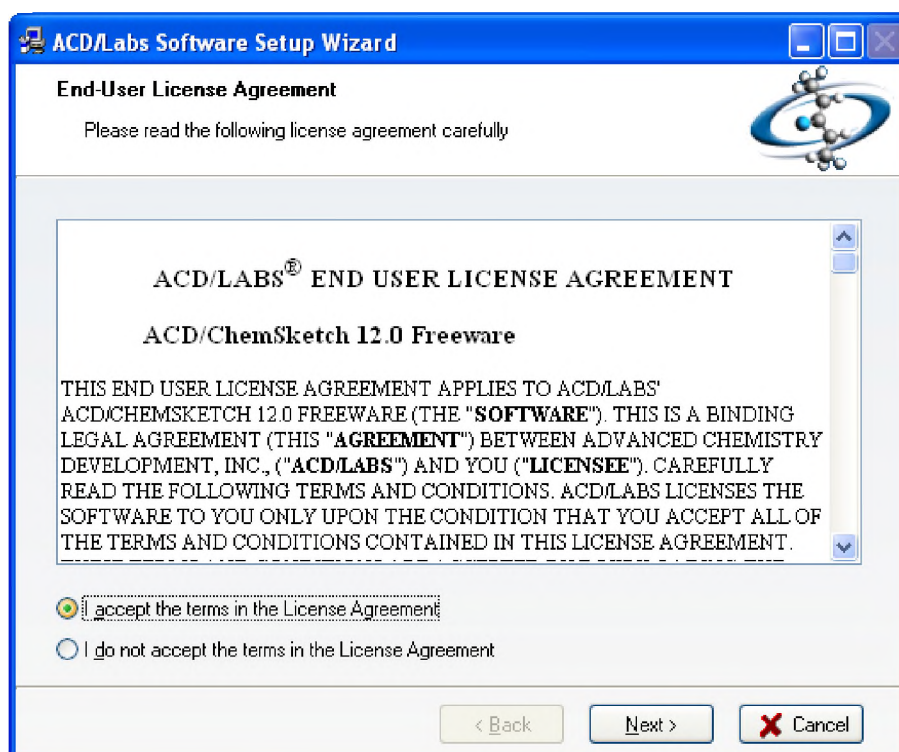


Рис. 1.2. Вікно ліцензійних домовленостей ACD/ChemSketch (Freeware)

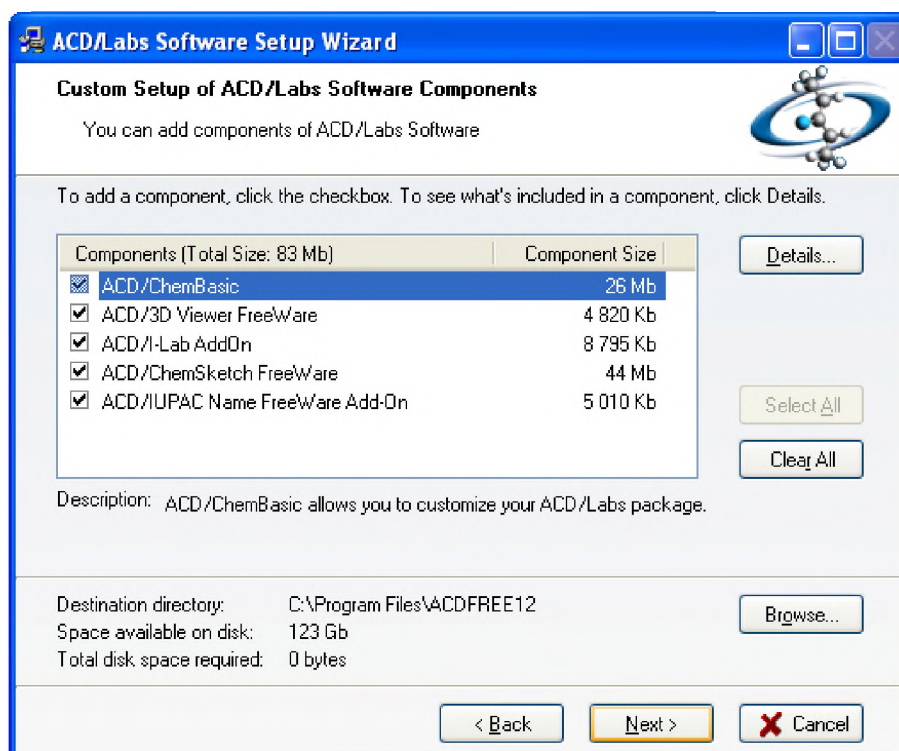


Рис. 1.3. Вікно вибору програмних засобів

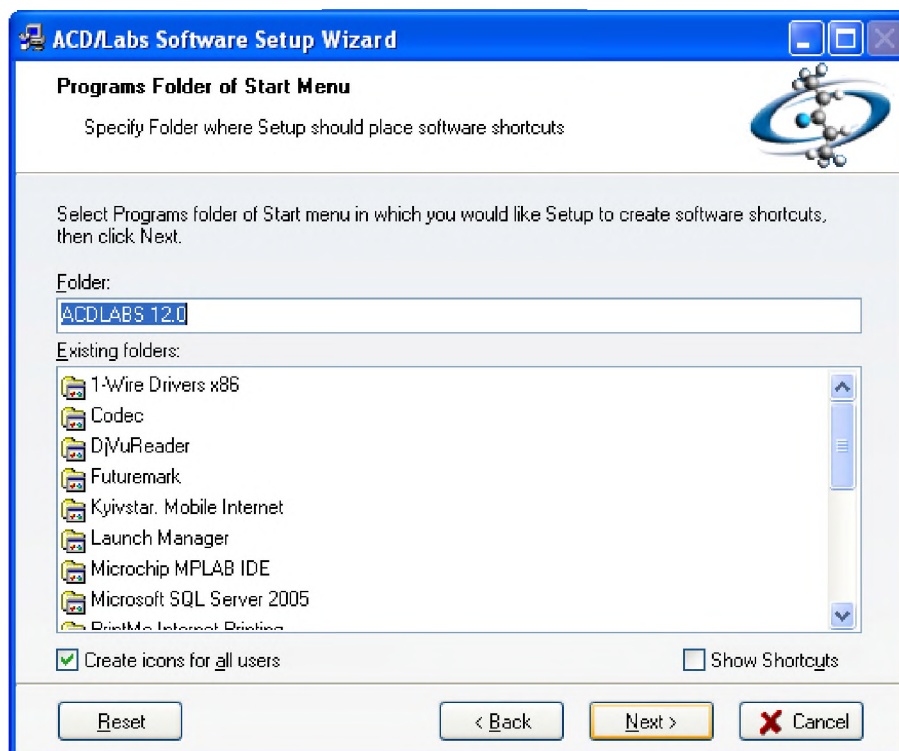


Рис. 1.4. Вікно вибору папки кнопки „Пуск” Windows

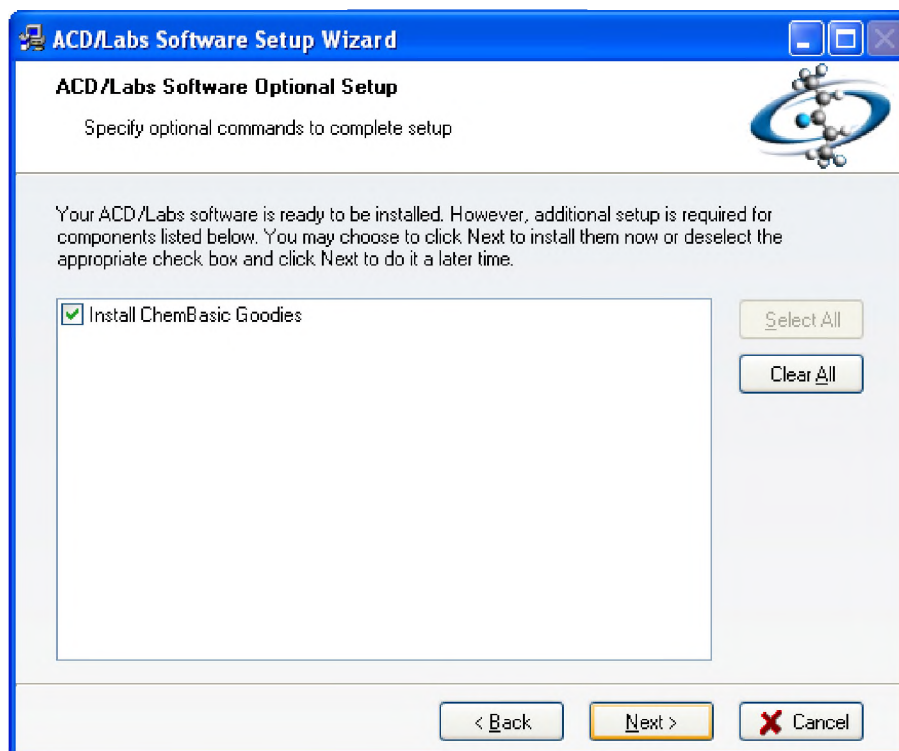


Рис. 1.5. Вікно інсталяції додаткових компонентів

Натисніть кнопку „**Next**”, розпочнеться інсталяція ПЗ (рис.1.6), дочекайтесь її завершення. В кінці інсталяції з’явиться вікно рис.1.7. Після натискання на кнопку „**Finish**” з’явиться вікно із ярликами програмних засобів та додаткових компонентів (рис.1.8).

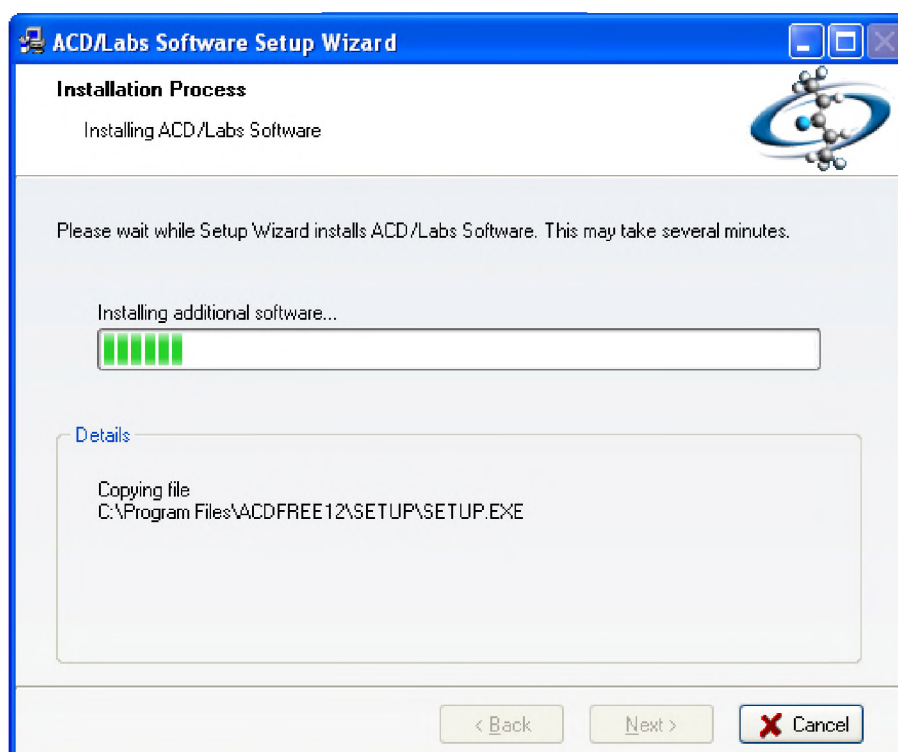


Рис. 1.6. Вікно інсталяції ПЗ

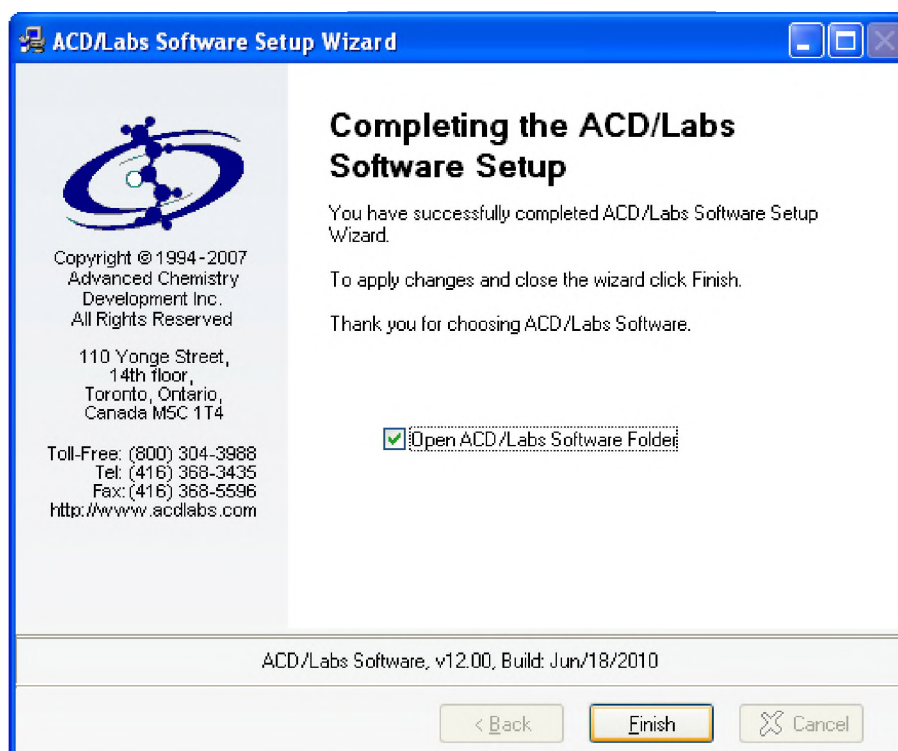


Рис. 1.7. Вікно завершення інсталяції ПЗ



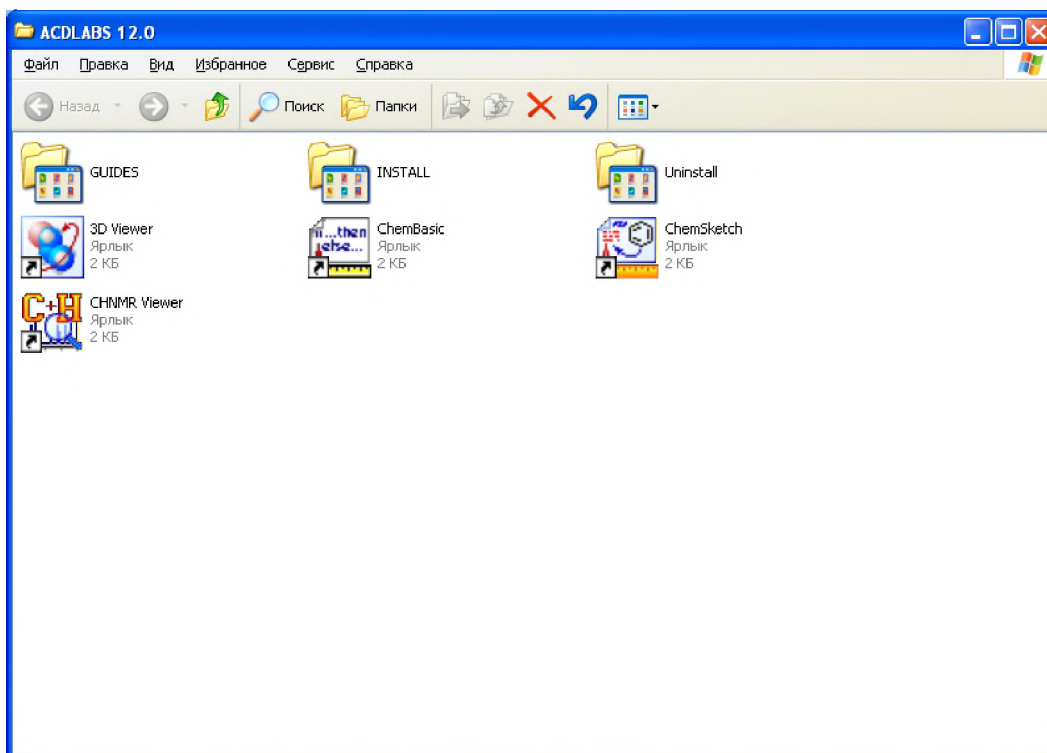


Рис. 1.8. Ярлики програмних засобів та додаткових компонентів

Після інсталяції через кнопку “Пуск” відкрийте папку “ACDLABS 12.0” (рис. 1.9).

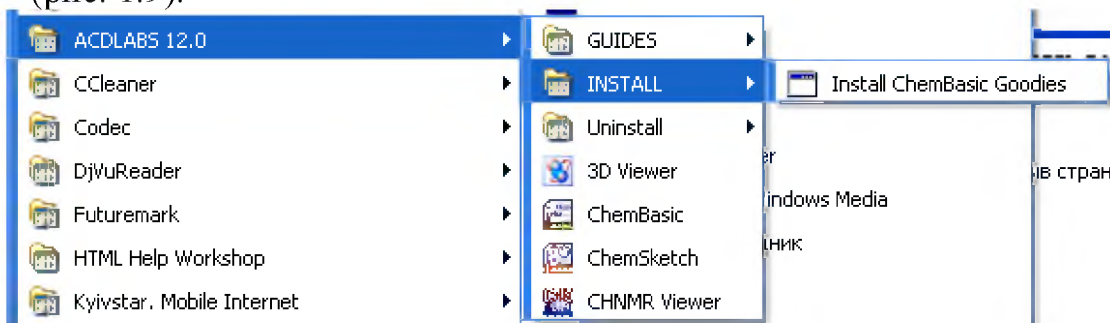


Рис. 1.9. Меню „Пуск” після інсталяції ПЗ

В цій папці знаходять:

- ярлик для **ChemSketch** – програма для написання формул;
- ярлик для **ChemBasic** – інструмент програмування для ChemSketch;
- ярлик для **CHNMR Viewer** – програма для прперегляду ЯМР спектрів;
- Папка „INSTALL”, в якій знаходиться програма для інсталяції програм, написаних на **ChemBasic** та документації до них. Якщо при інсталяції не було встановлено ці компоненти (рис.1.5) то запустіть цю програму.
- Папка „GUIDES” в якій знаходять ярлики: „3D Viewer User's Guide” - документація на 3D Viewer; “ChemBasic User's Guide” - документація на ChemBasic; „ChemSketch Reference Manual” та „ChemSketch Tutorial” – навчальний посібник на англійській мові по ChemSketch та ін. Документи можна відкрити через меню ПЗ: „Help”> “Documents”.

## 2. Основи роботи в редакторі ChemSketch

### 2.1. Перший запуск

Натисніть кнопку „Пуск”, виберіть „ACDLABS 12.0>ChemSketch”  
рис.2.1.

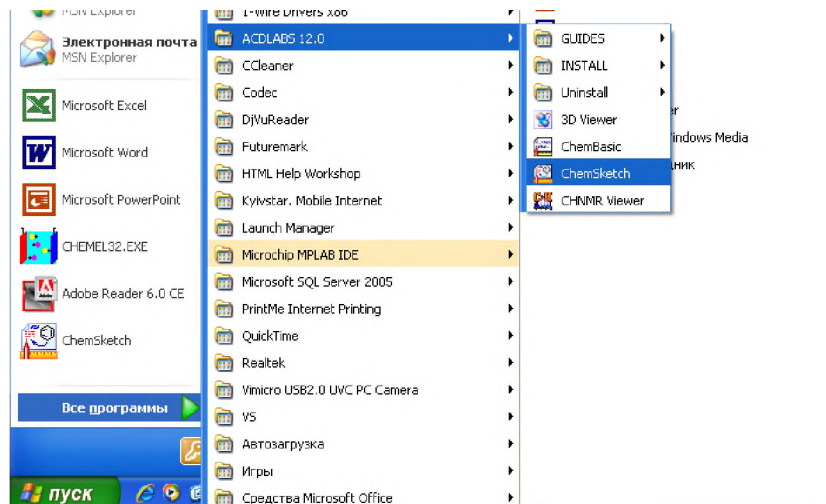


Рис. 2.1. Запуск ПЗ ChemSketch

При першому запуску з'явиться вікно (рис. 2.2). Натисніть кнопку „Ok”.

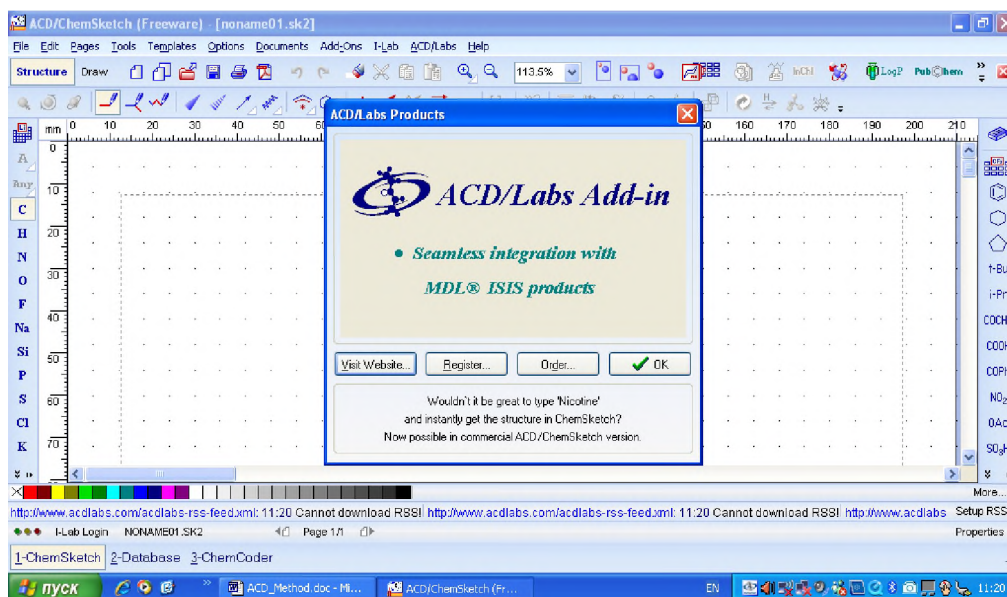
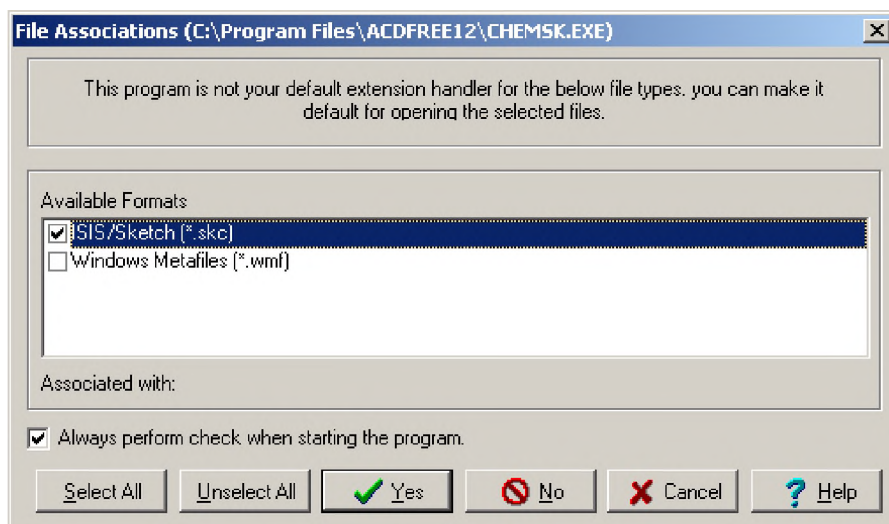


Рис.2.2. Вікно ПЗ ChemSketch при першому запуску

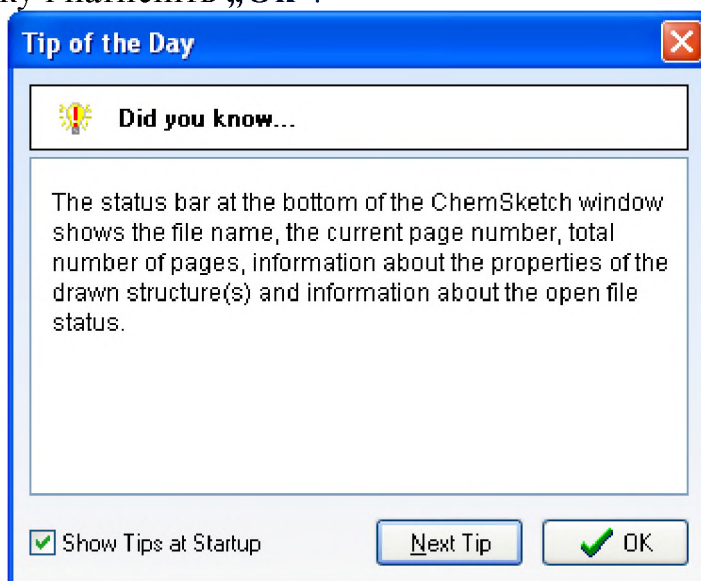
Після цього відкривається вікно, в якому можна налаштувати комп'ютер таким чином, щоб відображені у списку файли відкривалися за замовчуванням в ChemSketch (рис. 2.3). Наприклад, щоб файли типу \*.skc автоматично завантажувалися в ChemSketch, поставте галочку напроти надпису „ISIS/Sketch (\*.skc)” та натисніть „Yes”. Відкрити це вікно при наступних запусках програмного засобу можна із меню **File>File Associations...**





**Рис. 2.3. Встановлення налаштувань відкриття за замовчування для файлів певного типу у ChemSketch**

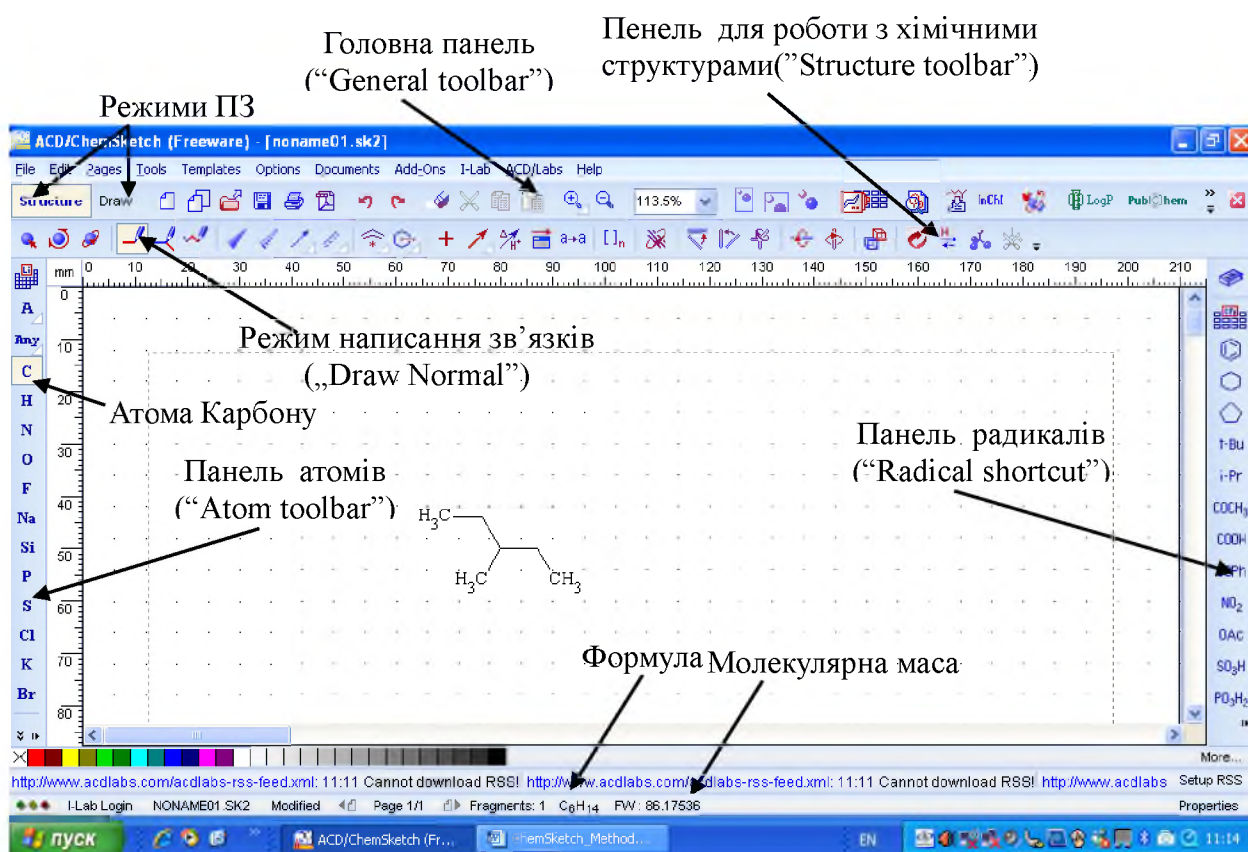
Далі буде відкрито вікно „Tip of Day” (рис. 2.4) – підказка дня, як краще користуватися ПЗ. Якщо бажаєте при вмиканні ChemSketch кожний раз бачити це вікно – залиште галочку справа в нижній частині вікна, якщо ні – приберіть галочку і натисніть „Ok”.



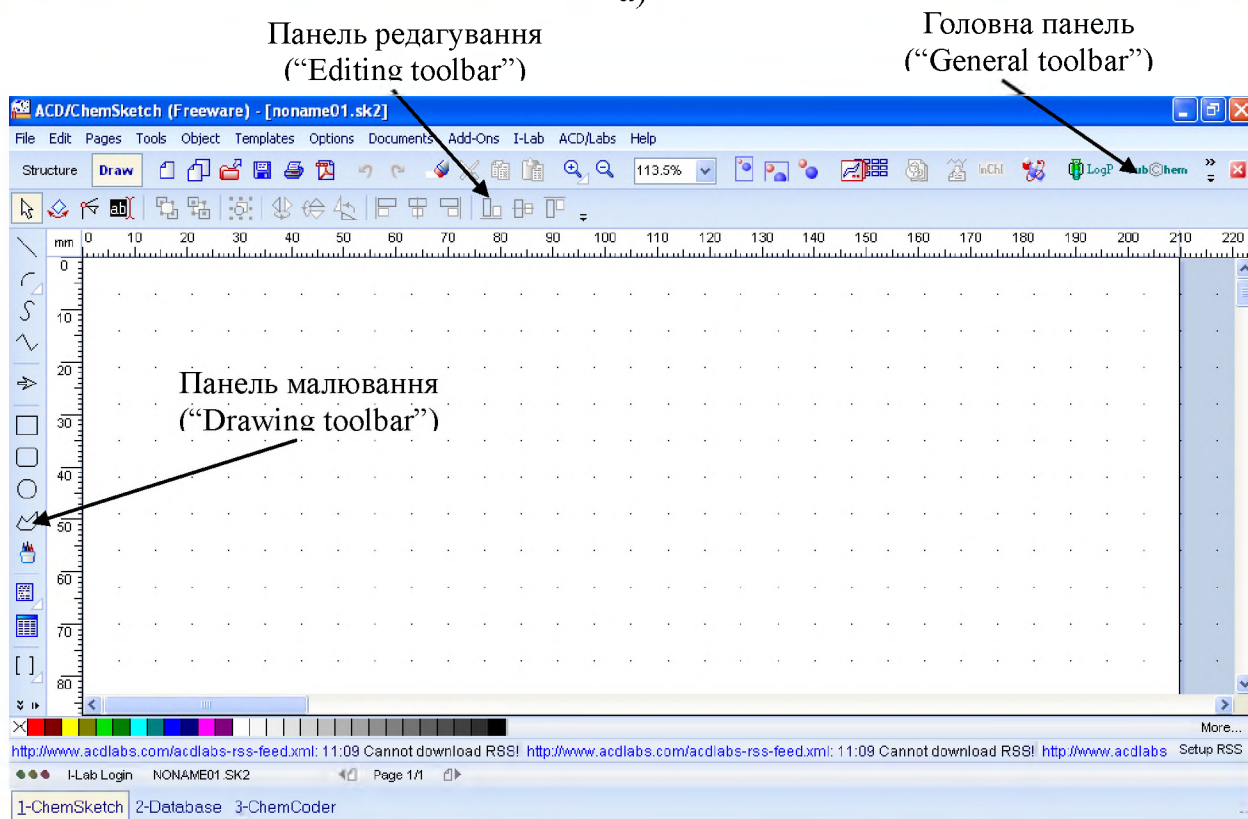
**Рис.2.4. Вікно „Tip of The Day”**

## 2.2. Основні панелі

**ChemSketch** має два режими (рис. 2.5): „**Structure**” (*Структура*) — молекулярний редактор; „**Draw**” (*Малювати*) — графічний редактор. Кнопки розміщені в верхній правій частині вікна. Перемикати режими також можна натискаючи **пробіл**. За замовчуванням завантажується режим „**Structure**”. При завантаженні ChemSketch за замовчуванням вмикаються кнопки "Нормальне малювання" („**Draw Normal**”) та „**C**” – „Атом Карбону” (рис. 2.5a).



а)



б)



























Рис. 2.5. Інтерфейс ПЗ ChemSketch

а) – режим „Structure”; б) режим „Draw”

Коротке пояснення призначення кнопок панелей наведено в табл. 2.1-2.4.

Таблиця. 2.1.

**Головна панель інструментів  
("General toolbar")  
(Активна в режимі "Structure" та „Draw”).**


Кнопка	Призначення
	Перемикає режим роботи в для написання формули
	Перемикає режим роботи в із режиму написання формул у режим малювання
	Створити новий документ
	Створити сторінку в документі
	Відкрити файл
	Зберегти файл
	Надрукувати
	Експортувати документ в формат *.PDF
	Відмінити операцію
	Застосувати відмінену операцію
	Видалити
	Вирізати
	Копіювати
	Вставити
	Збільшити
	Збільшити виділення
	Зменшити
	Збільшення, %
	Показати всю сторінку
	Показати сторінку по ширині
	Збільшити згідно надрукованого тексту
	Відкрити вікно шаблонів
	Назвати формулу
	Знаходить ідентифікатор IUPAC для формули (IUPAC International Chemical Identifier)
	Відобразити формулу в 3D
	Закрити документ

Таблиця 2.2.

**Панель інструментів для роботи із хімічними структурами  
("Structure toolbar")**

(Активна в режимі "Structure").















Кнопка	Призначення
	Виділити/перемістити
	Виділити/провернути/ змінити розмір
	3D обертання
	Спосіб виділення
	Малювання зв'язків (нормальний режим)
	Малювання зв'язків (продовження)
	Малювання ланцюгу.
	Наближений зв'язок
	Віддалений зв'язок
	Координаційні зв'язки
	Спеціальні зв'язки
	Делокалізовані зв'язки
	Помічені (затемнені) зв'язки
	„+” для написання рівняння реакції
	Стрілка реакції
	Додавання надписів до стрілки рівняння реакції
	Калькулятор реакцій
	Інструмент для творення карти реакції
	Інструмент для написання формул полімерів.
	Зміна позиції атомів ( $\text{—OH}$ , $\begin{array}{c} \text{—O} \\   \\ \text{H} \end{array}$ , $\begin{array}{c} \text{H} \\   \\ \text{—O} \end{array}$ )
	Встановлює зв'язки горизонтально
	Встановлює зв'язки вертикально
	Обертає молекулу навколо зв'язка
	Обертає зверху донизу
	Обертає справа вліво
	Створює тимчасовий шаблон (копіює молекулу)
	Очищує написану формулу (робить надпис раціональним)
	Знаходить таутомерні форми

	3D оптимізація
	Інструмент для прогнозування мас-спектрів

Таблиця 2.3.

### Панель інструментів для малювання ("Draw toolbar")






(Активна в режимі "Draw").

Кнопка	Призначення	Кнопка	Призначення
	Лінія		Еліпс
	Дуга		Багатокутник
	Крива		Вставка малюнка
	Складна лінія		Текст
	Стрілки		Таблиця
	Квадрат		Дужки
	Квадрат із заокругленими кутами		Виноска

Таблиця 2.4.

### Панель інструментів для редагування ("Editing toolbar")

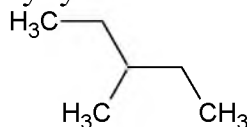
(Активна в режимі "Draw").

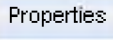
Кнопка	Призначення	Кнопка	Призначення
	Виділити/перемістити/змінити розмір		Розвернути справа наліво
	Виділити/перемістити/повернути		Розвернути зверху вниз
	Застосовується для редагування кривих та фігур		Повернути на 90°
	Редагування тексту		Помістити зліва
	Помістити на передній план		Помістити горизонтально по центру
	Помістити на задній план		Помістити справа
	Групувати		Помістити знизу
			Помістити вертикально по центру
			Помістити зверху

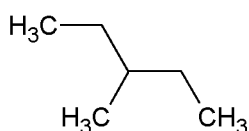
Для того щоб, написати формулу вуглеводню, наприклад, 3-метилпентану необхідно зробити клік – на листі з'явиться формула метану. Якщо зробити клік по формулі метану то буде додано гомологічну різницю і утвориться – формула етану. Натискаючи на групу -CH<sub>3</sub> – продовжимо




ланцюжок до 5 атомів Карбону. Натисканням на 3-й атом Карбону додаємо радикал  $-CH_3$  – отримаємо формулу 3-метилпентану:

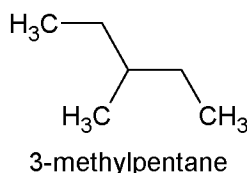



Після написання в нижній стрічці відображається брутто формула та відносна молекулярна маса речовини (рис. 2.5). Налаштувати рядок відображення властивостей молекули/речовини можна натиснувши на кнопку „**Properties**” (  ), яка знаходиться на цьому ж рядку справа. Буде розгорнуто список, із якого можна вибрати параметри (молярна маса, молярний об'єм, молярна рефракція, індекс рефракції, діелектрична константа та ін.). Якщо необхідно отримати багато розрахункових величин для формул, то можна виконати команду меню: „**Tools**”>„**Calculate**”>„**All Properties**”. Після цього буде відкрито вікно „**Calculation Results**” з розрахунками. Натиснемо на кнопку „**Copy To Editor**” - результати обчислень буде додано до листа:

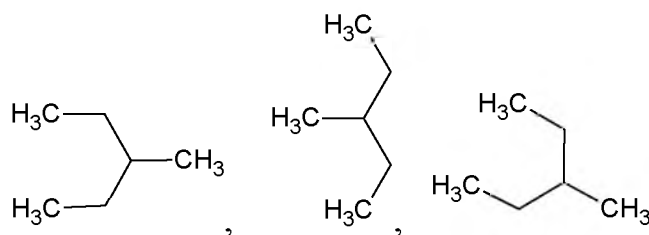


Molecular Formula	= $C_6H_{14}$
Formula Weight	= 86.17536
Composition	= C(83.63%) H(16.37%)
Molar Refractivity	= $29.80 \pm 0.3 \text{ cm}^3$
Molar Volume	= $127.9 \pm 3.0 \text{ cm}^3$
Parachor	= $268.2 \pm 4.0 \text{ cm}^3$
Index of Refraction	= $1.382 \pm 0.02$
Surface Tension	= $19.3 \pm 3.0 \text{ dyne/cm}$
Density	= $0.673 \pm 0.06 \text{ g/cm}^3$
Dielectric Constant	= $1.88 \pm 0.1$
Polarizability	= $11.81 \pm 0.5 \cdot 10^{-24} \text{ cm}^3$
Monoisotopic Mass	= 86.10955 Da
Nominal Mass	= 86 Da
Average Mass	= 86.1754 Da
M+	= 86.109002 Da
M-	= 86.110099 Da
[M+H] <sup>+</sup>	= 87.116827 Da
[M+H] <sup>-</sup>	= 87.117924 Da
[M-H] <sup>+</sup>	= 85.101177 Da
[M-H] <sup>-</sup>	= 85.102274 Da

Можна перевірити правильність написання формули, знайшовши її назву. Для цього необхідно виділити формулу і натиснути кнопку „**Generate Name for Structure**” (  ):



Для покращення вигляду формули натискаємо на кнопку  („**Clean Structure**” – очистити структуру). При багаторазовому натисканні на цю кнопку форма запису буде змінюватися:



Якщо до складу формули входять не тільки атоми Карбону та Гідрогену, наприклад у формулі 3-бромпентану або 2-амінопентану, то необхідно скористатися правою вертикальною панеллю. Якщо і на цій панелі відсутній необхідний атом, то запустіть таблицю Менделєєва – кнопка - у верхній частині лівої панелі (рис.2.6).

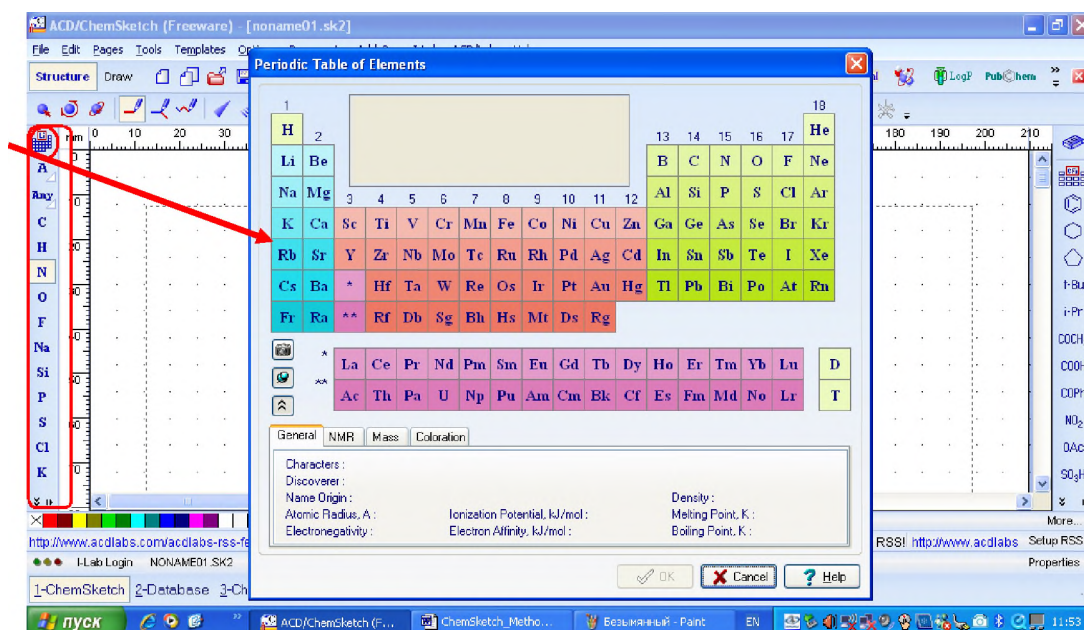


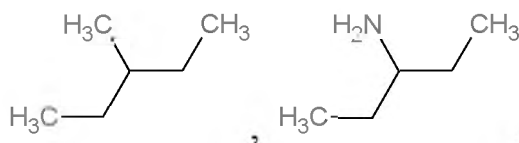
Рис.2.6. Періодична таблиця елементів


Зверніть увагу також на кнопки розтошовані в нижній частині правої та лівої панелі:


- що розгортає панель ;
- на кнопку для налаштування кнопок панелі (вибір кнопок, які будуть відображатися на панелі);
- та кнопки помічені трикутником в правій нижній частині (наприклад що відкривають меню кнопки для налаштування):

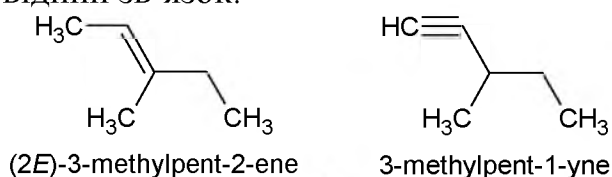



Для того, щоб змінити формулу 3-метилпентану на 3-амінопентан, виберіть атом Нітрогену (N) – на правій панелі або в періодичній таблиці і натисніть на радикал метил при увімкненому режимі (“Draw Normal”):

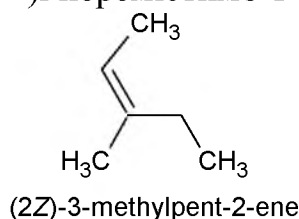




При написанні 3-амінопентану можна також використати інший спосіб: напишемо молекулу пентану, а потім виберемо інструмент:  (“**Draw Continuous**”) та атом Нітрогену на лівій панелі або у періодичній таблиці. Натиснемо на 3-тій атом Карбону – відбувається його виділення, повторне натискання додає аміногрупу.

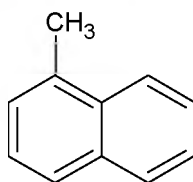
Для того, щоб змінити кратність зв’язку, наприклад, написати формулу 3-метилпент-2-ену або 3-метилпент-1-іну виберіть інструмент  і натискайте на відповідний зв’язок:



Для того, щоб змінити цис- ізомер 3-метилпент-2-ену на транс-, виберемо інструмент  (“**Select/Move**”) і перемістимо 1-ший атом Карбону:



У правій частині головного вікна знаходиться панель радикалів. Ця панель суттєво допомагає прискорити набір формул. Наприклад, для набору формули 2-метилнафталіну вибираємо . Конструюємо формулу нафталіну. Вибираємо  на лівій панелі. Робимо клік по другому атому Карбону:



### 2.3. Завдання для самоконтролю:

- 1) Запишіть формули:
 

a) ізомерів гексану;	e) олеїнової кислоти;
b) ізомерів пентанолу;	f) 2-етилантрацену;
c) цис- та транс- 4-етил-2-метилгептену-3;	g) фурану;
d) оцтової кислоти;	h) метилфурфуролу;
	i) нафталіну.
- 2) Згенеруйте назви для написаних формул.



### 3. Стилi

#### 3.1. Влаштованi стилi

Стилi написання формул встановлюються через меню „**Option >Set Structure Draw Style**” рис.3.1. Стилi визначають шрифт, розмiр шрифту, колiр, чи будуть вiдображатися атоми Гiдрогену та Карбону та iн..

При завантаженнi програмного засобу за замовчуванням встановлюється стиль „**Normal**” (рис. 3.1).

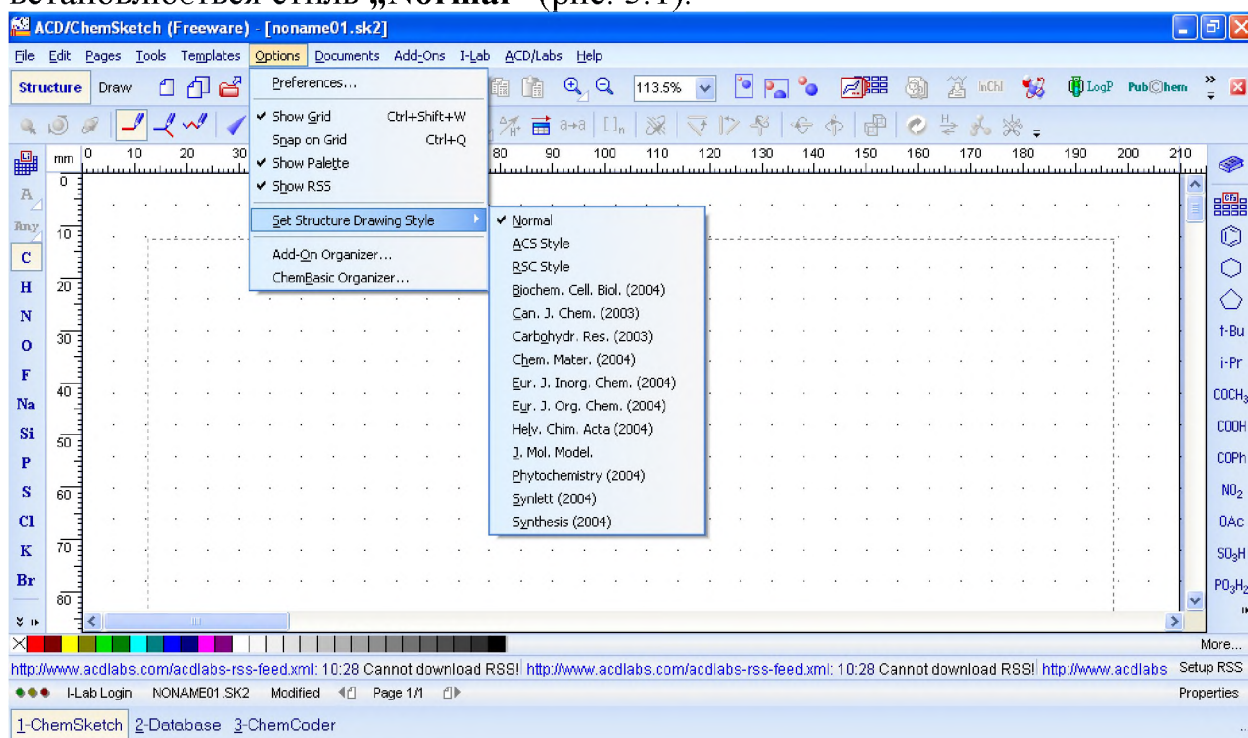


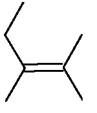
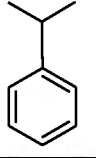
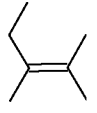
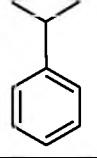
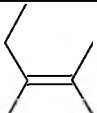
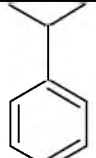
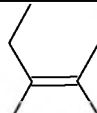
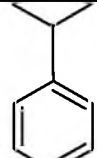
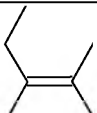
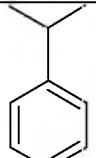
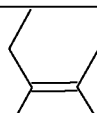
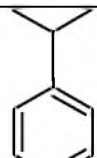
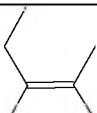
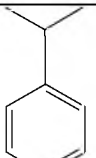
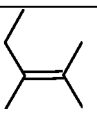
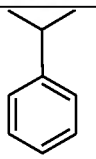
Рис. 3.1. Встановлення стилів написання формул.

Європейські стилі написання формул суттєво відрізняються від стилів пострадянських країн табл. 3.1.

Таблиця. 3.1.

Влаштовані стилі ChemSketch

Стиль	Формула				
Normal			Biochem. Cel. Biol. (2004)		
			Can. J. Chem (2003)		
ACS Style			Carbohydr. Res (2003)		
RSC Style					

Chem. Mater. (2004)			Phytochemistry (2004)		
Eur. J. Inorg. Chem. (2004)			Synlett (2004)		
Eur. J. Org. Chem. (2004)			Synthesis (2004)		
Helv. Chim. Acta. (2004)					
J. Mol. Model.					

### 3.2. Налаштування стилю за замовчуванням. Панель „Properties”

#### 3.2.1. Панель „Properties” вкладка „Common”

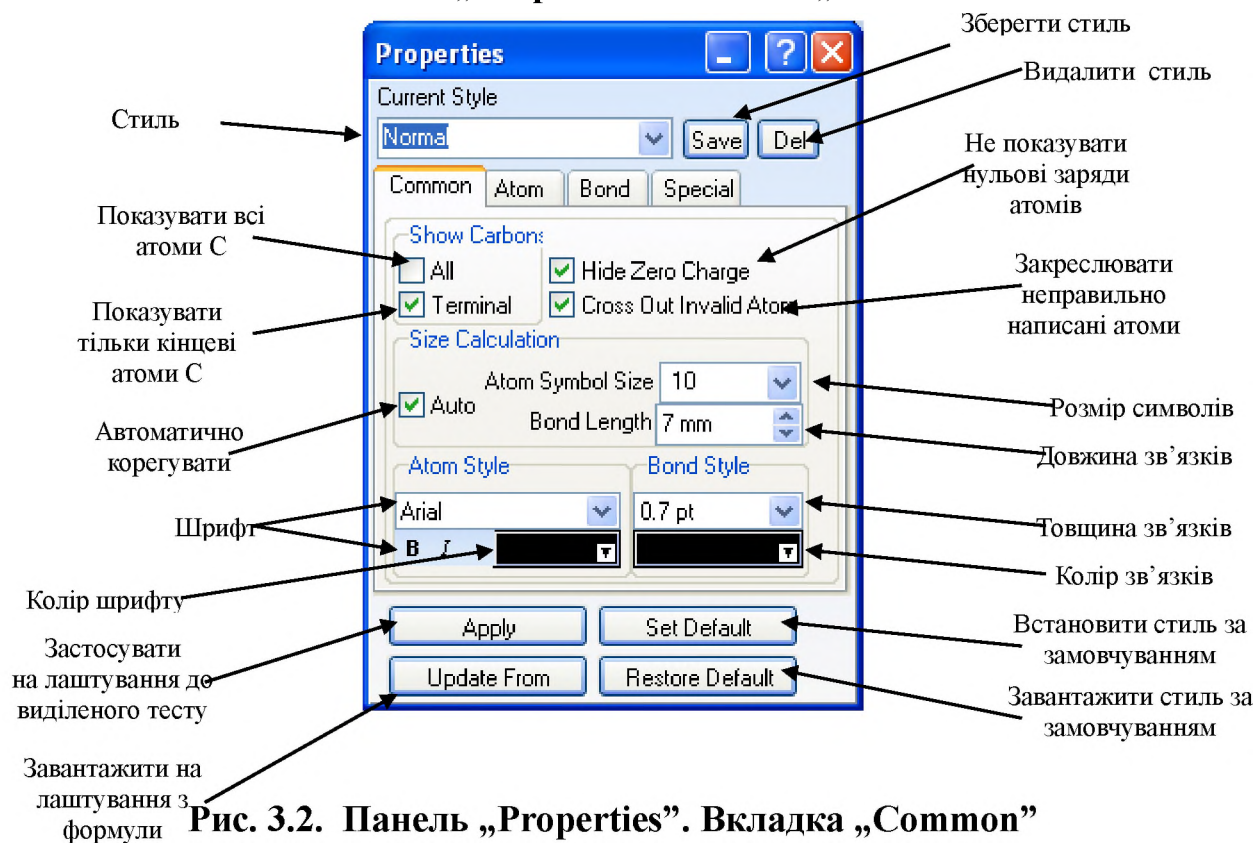


Рис. 3.2. Панель „Properties”. Вкладка „Common”

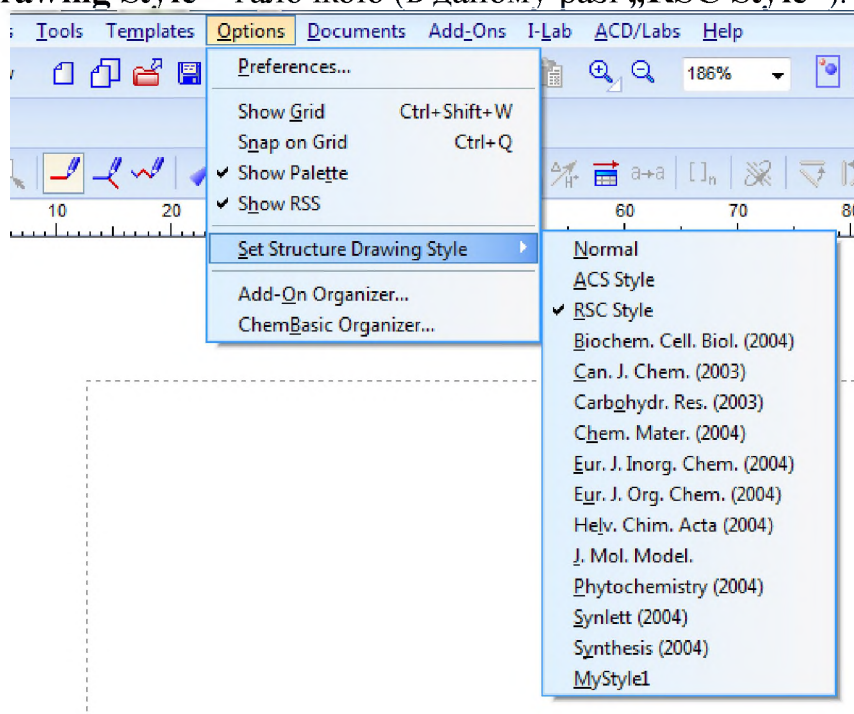
Для того, щоб налаштувати стиль за замовчуванням (той, який буде

завантажуватися під час запуску ПЗ), необхідно спочатку відкрити панель **“Properties”** (рис. 3.2). Це можна зробити через меню **„Tools>Structure Properties”** або натисканням клавіш **Alt+Shift+S**. Панель має чотири вкладки: **“Common”** – загальні налаштування, **“Atom”** – атом, **“Bond”** – зв’язок, **“Special”** – спеціальні.

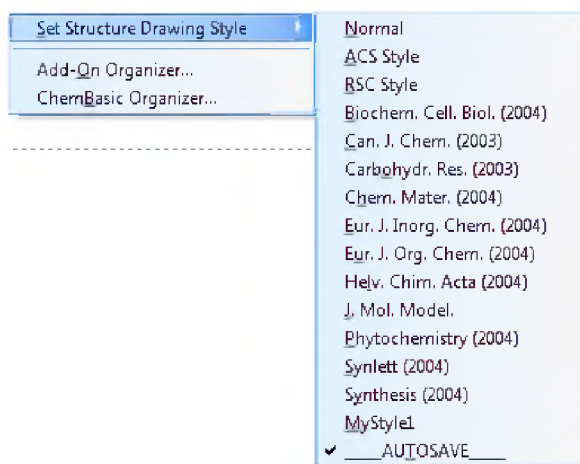
У вкладці **“Common”** налаштовуються:

- шрифт: розмір, стиль (курсив, жирний, нормальний), колір. Розмір шрифту може автоматично корегуватися, коли змінюється довжина зв’язку. Для цього треба увімкнути опцію **„Auto”**;
- довжина та колір зв’язку. Довжина зв’язку може автоматично корегуватися, коли змінюється шрифт – для цього треба увімкнути опцію **„Auto”**;
- встановлюється спосіб відображення атомів Карбону: не показувати атоми Карбону (увімкнені опції **„Terminal”** та **„All”**) показувати тільки крайні атоми Карбону (увімкнена опція **„Terminal”**); показувати всі атоми Карбону (увімкнена опція **„All”**);
- при увімкненій опції **“Cross Out Invalid Atom”** підкреслюються неправильно написані атоми, наприклад, валентність Карбону не IV”;
- при увімкненій опції **„Hide Zero Charge”** не буде відображатися заряд атома, коли його заряд дорівнює нулю.

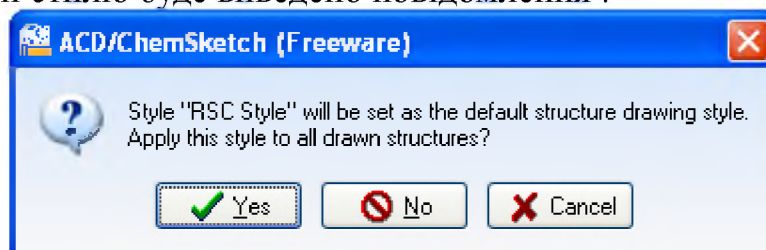
Для встановлення стилю за замовчуванням необхідно натиснути кнопку **Set Default**. Стиль за замовчуванням позначається в меню **„Option”>„Set Structure Drawing Style”** галочкою (в даному разі **„RSC Style”**):



Якщо стиль за замовчування створювався на основі влаштованого і не був збережений, як стиль користувача, то після закриття програми в список стилів буде додано стиль з ім'ям **„AUTOSAVE”** (автоматично збережений), який і буде вибрано за замовчуванням. Після повторного завантаження програмного засобу ми побачимо:



При зміні стилю буде виведено повідомлення :



Якщо необхідно застосувати стиль (в даному разі “RSC Style”) до вже написаних формул, необхідно натиснути кнопку „Yes”. При натисканні кнопки “No”, до формул, набраних раніше, вибраний стиль застосований не буде.

Якщо у Вас уже набраний текст і необхідно застосувати такі налаштування, як і для набраного тексту, то необхідно натиснути на кнопку **Update From**, а потім стрілку з написом „FROM” піднести до формули (рис.3.3).

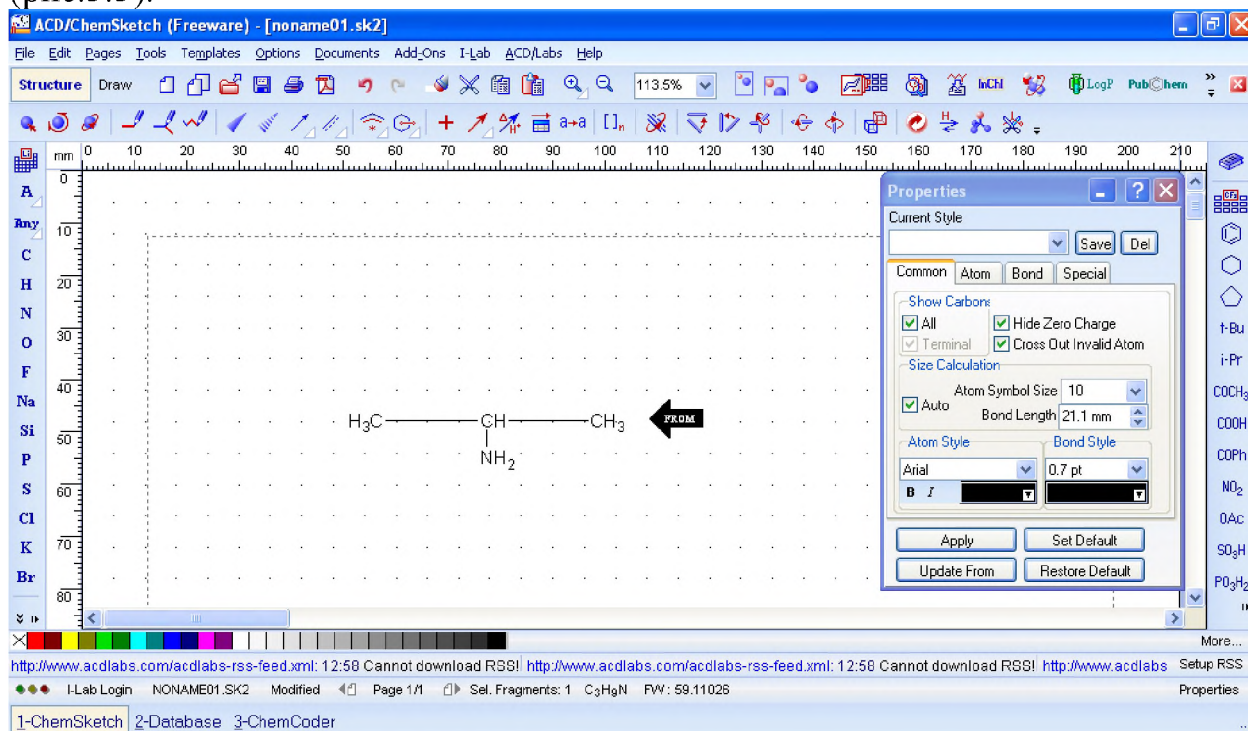


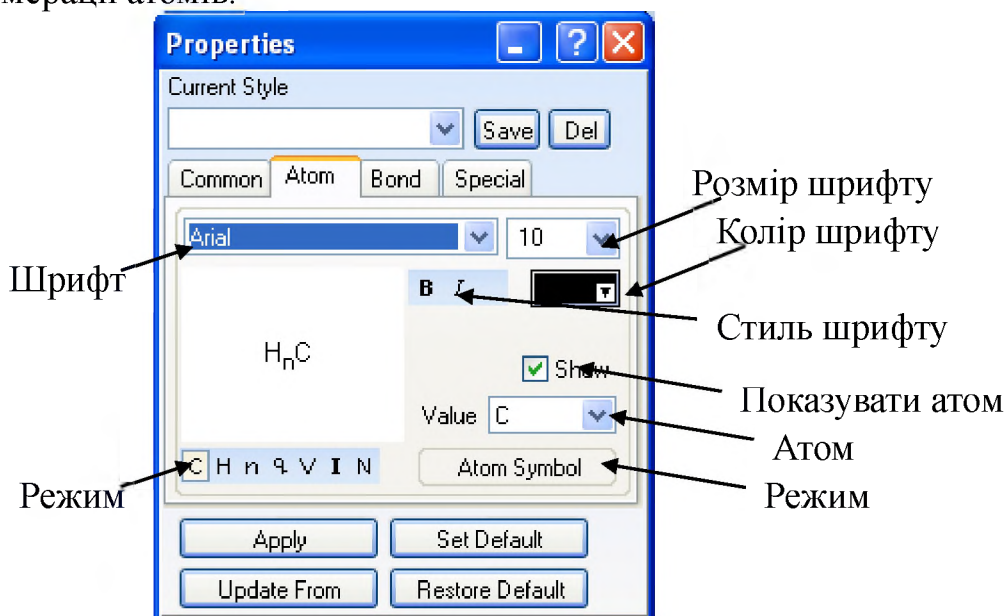
Рис.3.3. Отримання налаштувань стилю із формули



Після цього стиль буде завантажено до вікна **“Properties”**, при чому будуть задіяні налаштування у всіх вкладках . В подальшому ці налаштування можна використати як для створення стилю за замовчуванням, так і створення власного (див. розділ 3.2.).

### 3.2.2. Панель **„Properties”** (**“Властивості”**) вкладка **„Atom ”** (**“Атом”**)

У вкладці **„Atom ”** здійснюється налаштування стилю відображення атомів Карбону, Гідрогену, та інших атомів, індексів, заряду, валентності, атомної маси, нумерації атомів.



**Рис.3.4. Вікно **„Properties”**. Вкладка **„Atom”**  
режим **„C”** (**„Atom Symbol”**)**

Вибравши режим **„C ”** (**„Карбон ”**) , можна налаштувати спосіб відображення атомів **„скелету”** молекули (рис. 3.4-3.5). Після цього стиль буде завантажено до вікна **“Properties”**, при чому будуть задіяні налаштування у всіх вкладках .

В подальшому ці налаштування можна використати як для створення стилю за замовчування, так і створення власного (див. розділ 3.2.).

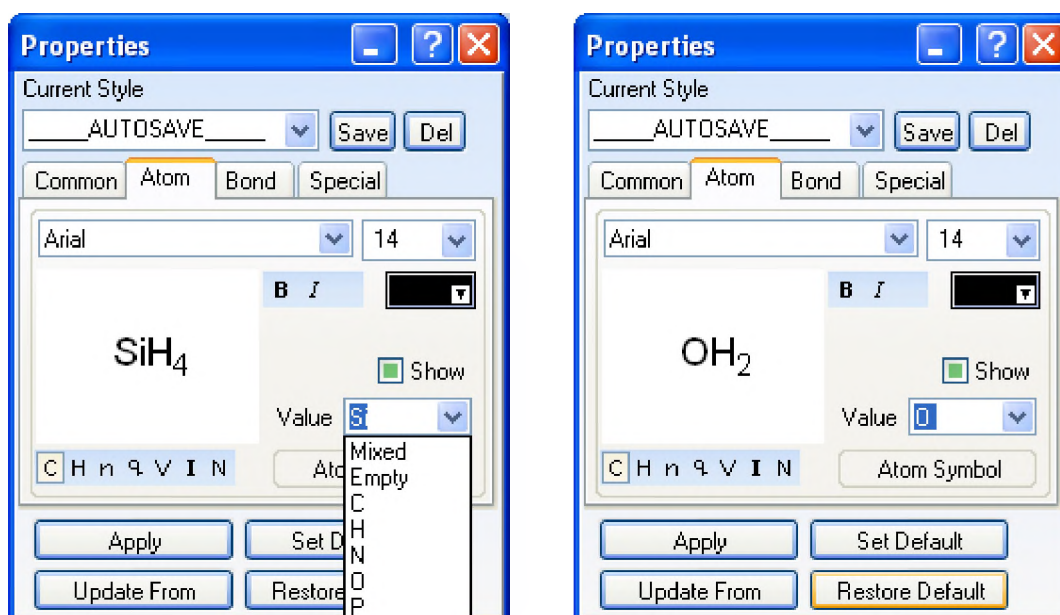


Рис.3.5. Налаштування вікна „Properties”. Вкладка „Atom”

Після цього стиль буде завантажено до вікна “Properties”, при чому будуть задіяні налаштування у всіх вкладках .

В подальшому ці налаштування можна використати як для створення стилю за замовчування, так і створення власного (див. розділ 3.2.).

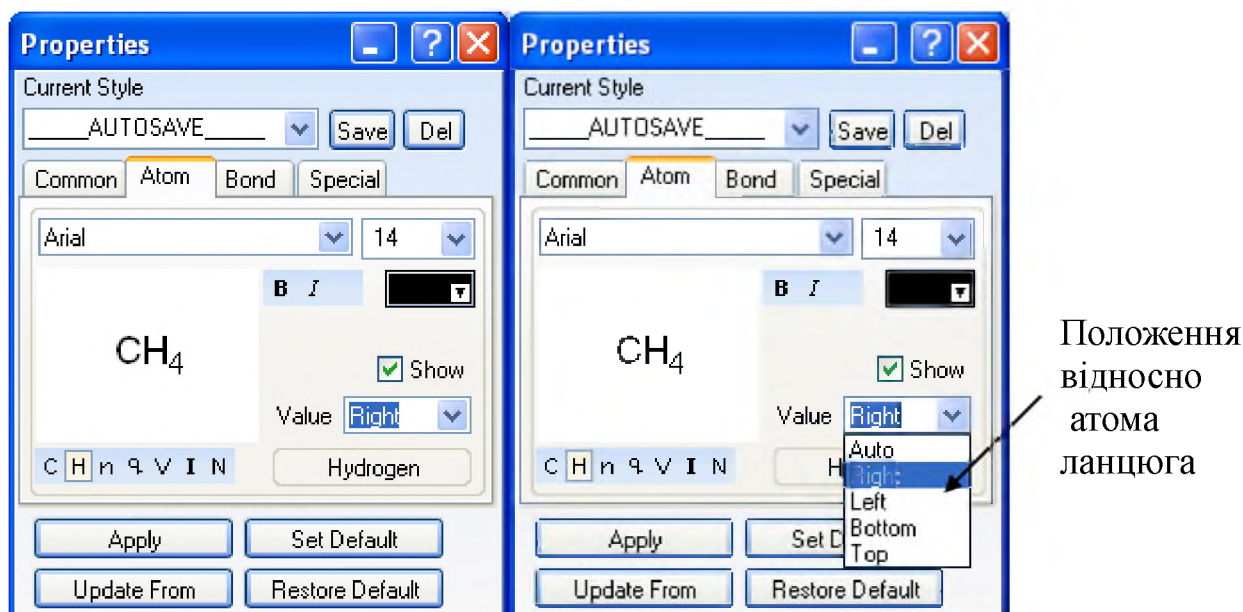


Рис.3.6. Вікно „Properties”. Вкладка „Atom”  
режим „Н” (“Hydrogen”) – Гідроген

Вибравши режим „n” („Індекс ”), можна налаштувати спосіб відображення цифр індексів (рис. 3.7), наприклад, зміщення індексу по вертикалі відносно атома.

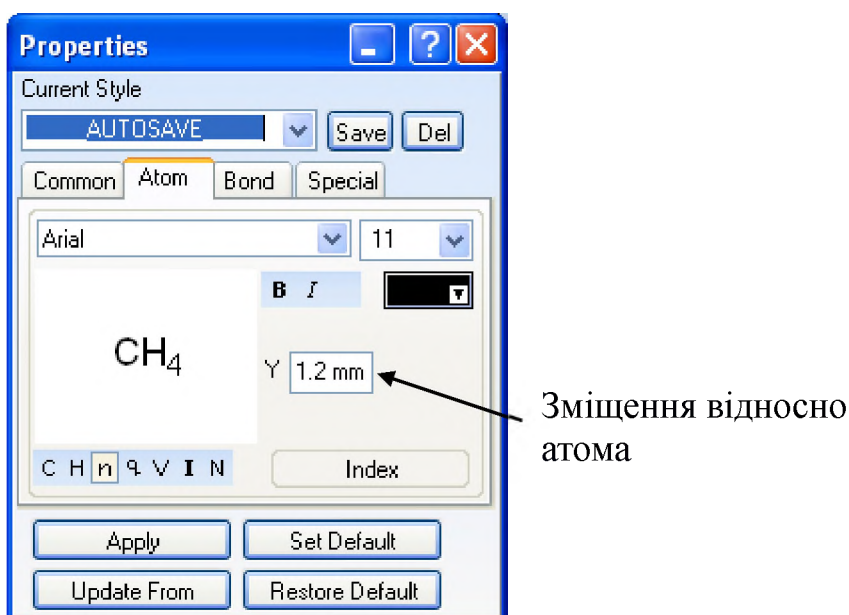


Рис.3.7. Вікно „Properties”. Вкладка „Atom”  
режим „n” (“Index”) – „Індекс”

Увімкнення режиму „Заряд” >(q, Charge) дозволяє налаштувати спосіб відображення цифр та символів зарядів атомів (рис. 3.8).

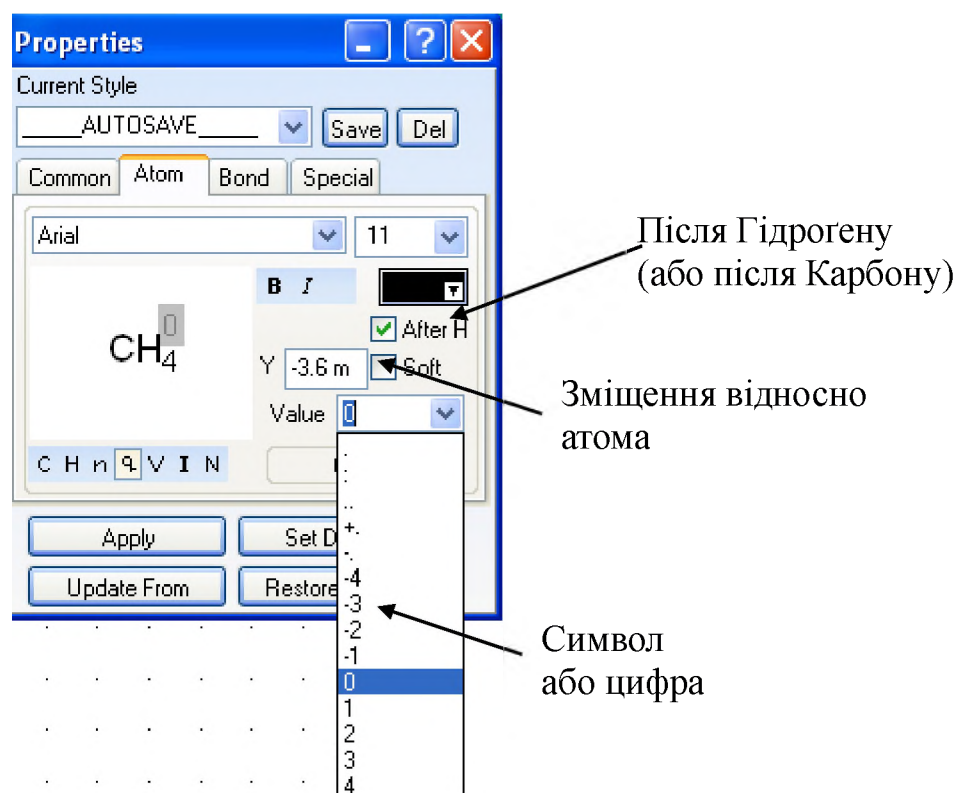
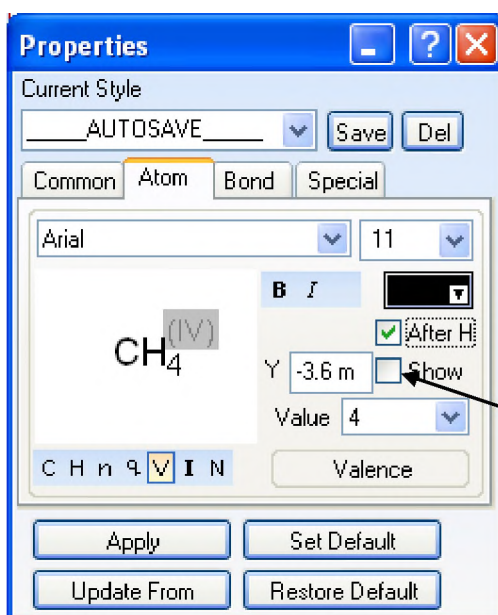


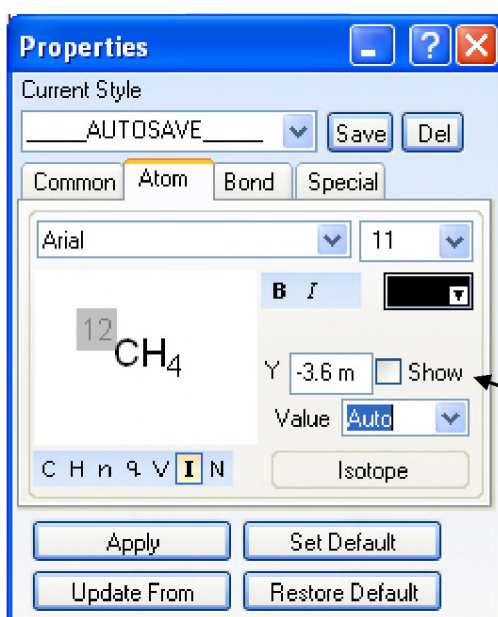
Рис.3.8. Вікно „Properties”. Вкладка „Atom”  
режим „q” (“Charge”) – „Заряд”

Вибравши режим „Валентність” (“V”, “Valence”), можна налаштувати спосіб відображення валентностей (рис. 3.9).



**Рис.3.9. Вікно „Properties”. Вкладка „Atom” режим “V” (“Valence”) – “Валентність”**

При натисканні кнопки “I” буде вибрано режим „Ізотоп” (рис.3.10.), який дозволяє налаштувати спосіб відображення атомних мас ізотопів.



**Рис.3.10. Вікно „Properties”. Вкладка „Atom” режим “I, (Isotope)” – “Ізотоп”**



Спосіб нумерації (шрифт, позиція та ін.) атомів можна налаштувати, вибравши режим „N”, „Numbering” (рис. 3.11).

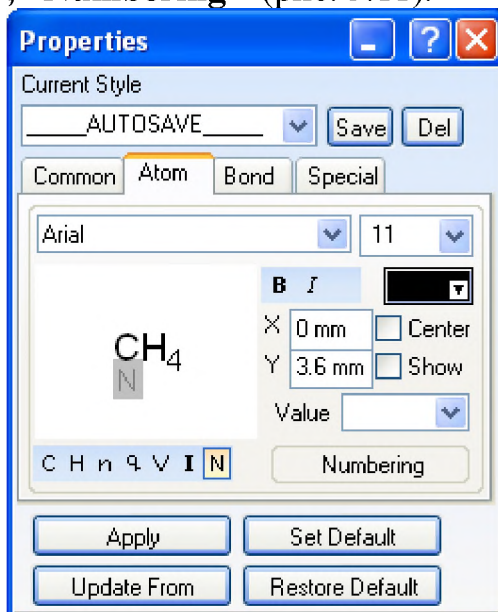


Рис.3.11. Вікно „Properties”. Вкладка „Atom”, режим „N” (Numbering)” – нумерація

### 3.2.3. Панель „Properties” вкладка „Bond” („Зв’язок”)

У вкладці „Bond” – “Зв’язок” налаштовується спосіб відображення зв’язків: одинарних, подвійних, потрійних, стерео – (рис. 3.12).

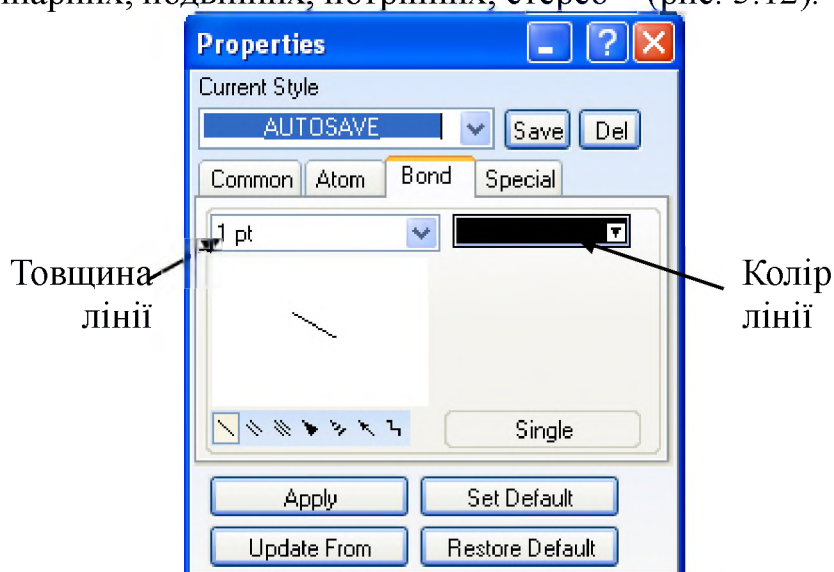


Рис. 3.12. Вікно „Properties”. Вкладка „Bond”, режим „” - „Одинарний зв’язок”

В режимі „Single” - одинарний зв’язок налаштовується колір і товщина лінії (рис. 3.13):

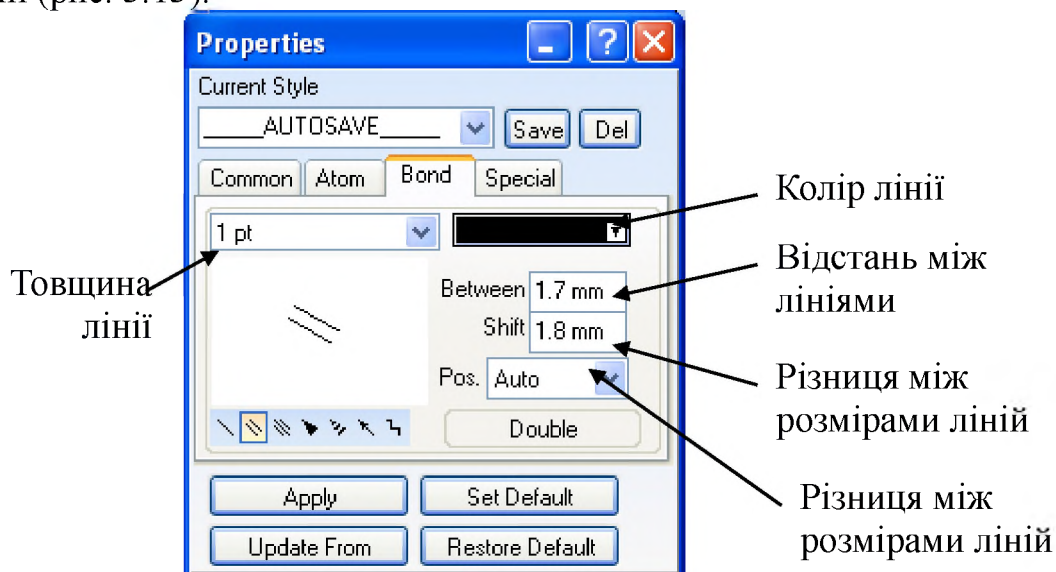


Рис.3.13. Вікно „Properties”. Вкладка „Bond”, режим „Double” - „Подвійний зв’язок”.

Режим „Double” - „Подвійний зв’язок” - дозволяє також налаштовувати колір та товщину лінії. Крім того, може бути налаштована відстань між лініями („Between”), різниця довжин ліній (наскільки друга лінія буде коротша за першу) („Shift”) та спосіб розміщення ліній („Pos.”). Опції „Shift” та „Pos.” тісно пов’язані між собою (рис. 3.12, 3.13, 3.14):

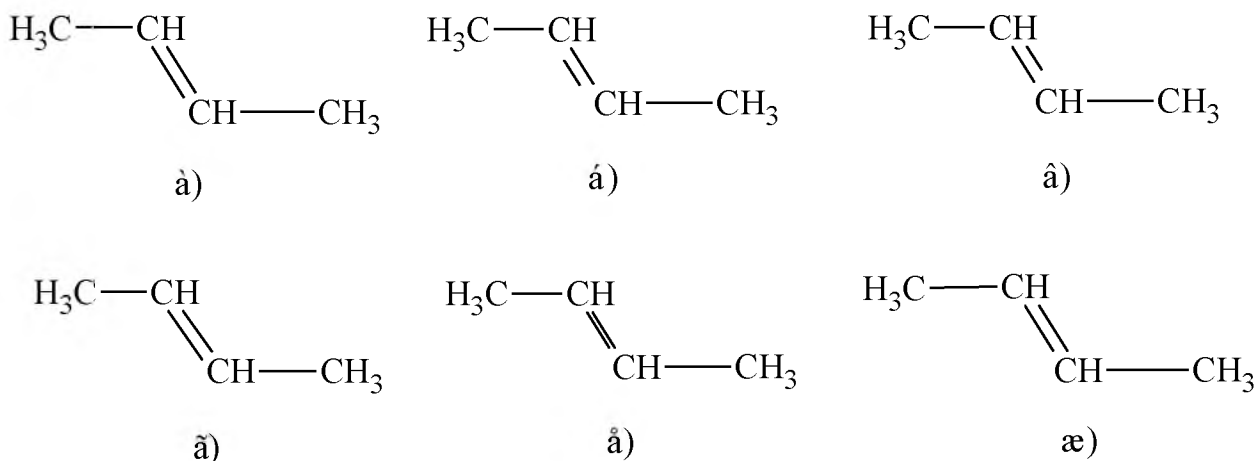


Рис.3.14. Способи написання подвійного зв’язку:

- а) „Between” = 1,7мм; „Shift” = 1,8мм; („Pos.” = Auto);
- б) „Between” = 1,7мм; „Shift” = 4мм; („Pos.” = Asymm 1);
- г) „Between” = 1,7мм; „Shift” = 4мм; („Pos.” = Asymm 2);
- д) „Between” = 1,7мм; „Shift” = 4мм; („Pos.” = Symm);
- е) „Between” = 0,7мм; „Shift” = 4мм; („Pos.” = Symm);
- ж) „Between” = 1,7мм; „Shift” = 1,8мм; („Pos.” = Mixed).

Інтерфейс вкладки в режимі „Triple” - („Потрійний зв’язок”) подібний до інтерфейсу вкладки в режимі „Double” („Подвійний зв’язок”) (рис.3.15) за виключенням того, що відсутня опція „Pos.”.

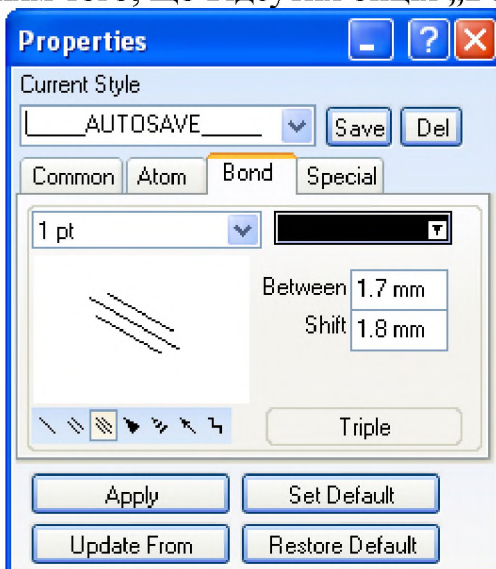


Рис. 3.15. Вікно „Properties”. Вкладка „Bond”, режим „Triple” - „Потрійний зв’язок”

Вкладка має два режими для налаштування відображення стерео зв’язків - „Up Stereo” – приближений та „Down Stereo” - віддалений. Інтерфейс вкладки в режимі „Up Stereo” подібний до інтерфейсу в режимі „Single” за виключенням того, що є опція „Width”, яка визначає потовщення лінії (рис. 3.16, 3.17).

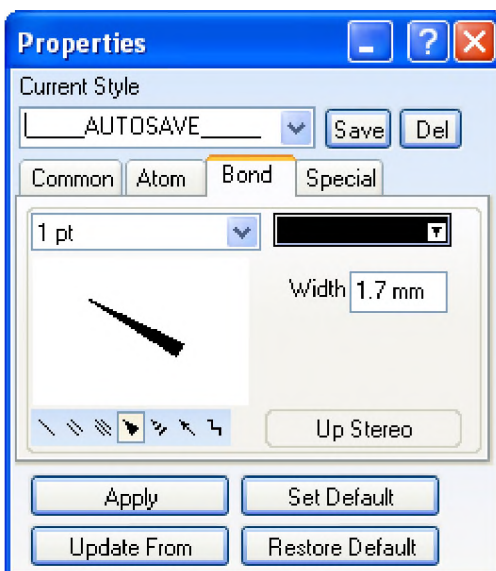
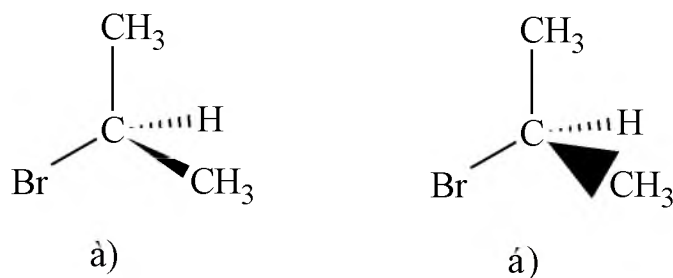
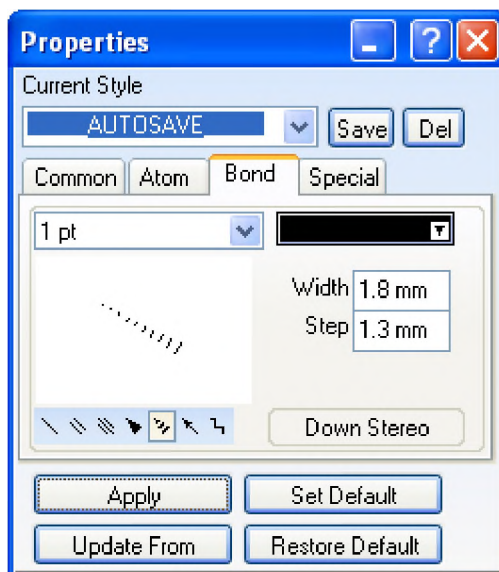


Рис.3.16. Вікно „Properties”. Вкладка „Bond”, режим „Up Stereo” - „Приближений зв’язок”

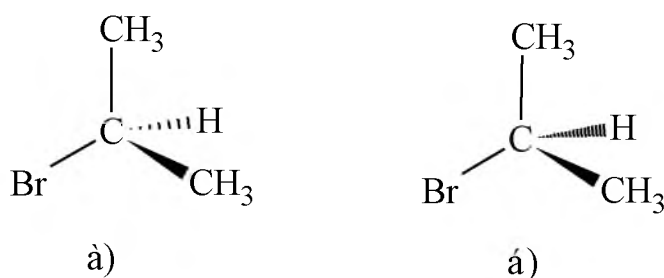


**Рис.3.17. Способи написання приближеного зв'язку:**  
а) “Width” = 1,7мм; б) “Width” = 7мм.



**Рис.3.15. Вікно „Properties”. Вкладка „Bond”, режим „Down Stereo” - „Віддалений зв’язок”.**

Інтерфейс вкладки в режимі “Down Stereo” подібний до інтерфейсу в режимі “Up Stereo” за виключенням того, що є опція, яка дозволяє встановлювати відстань між паралельними лініями зв’язку – „Step” (рис.3.15, 3.16).



**Рис.3.16. Способи написання віддаленого зв’язку:**  
а) “Step” = 1,3мм; б) “Width” = 0,5мм.

Параметри написання координаційних зв’язків встановлюються в режимі “Coordinating” - (рис.3.17).



### 3.2.4. Панель „Properties” вкладка „Special ” („Спеціальні ”)

Вкладка „Special” (рис.3.19) дозволяє налаштувати колір та спосіб (суцільна заливка, штрихування) виділення фрагментів молекул.

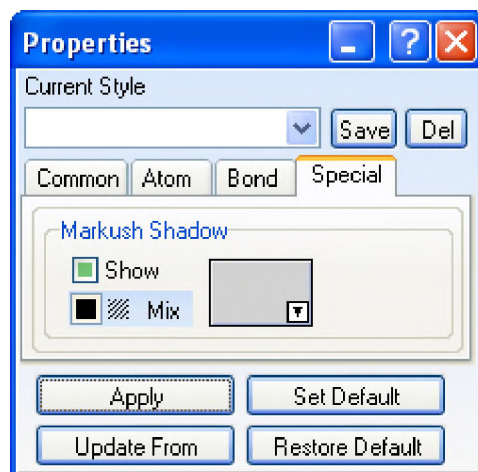


Рис.3.19. Вікно „Properties”. Вкладка „Special”

Налаштування (рис. 3.20) застосовуються при використанні таких функцій, як „Added Or Removed Fragment With Shadow ” або ”Markush Bond With Shadow ” верхньої панелі:

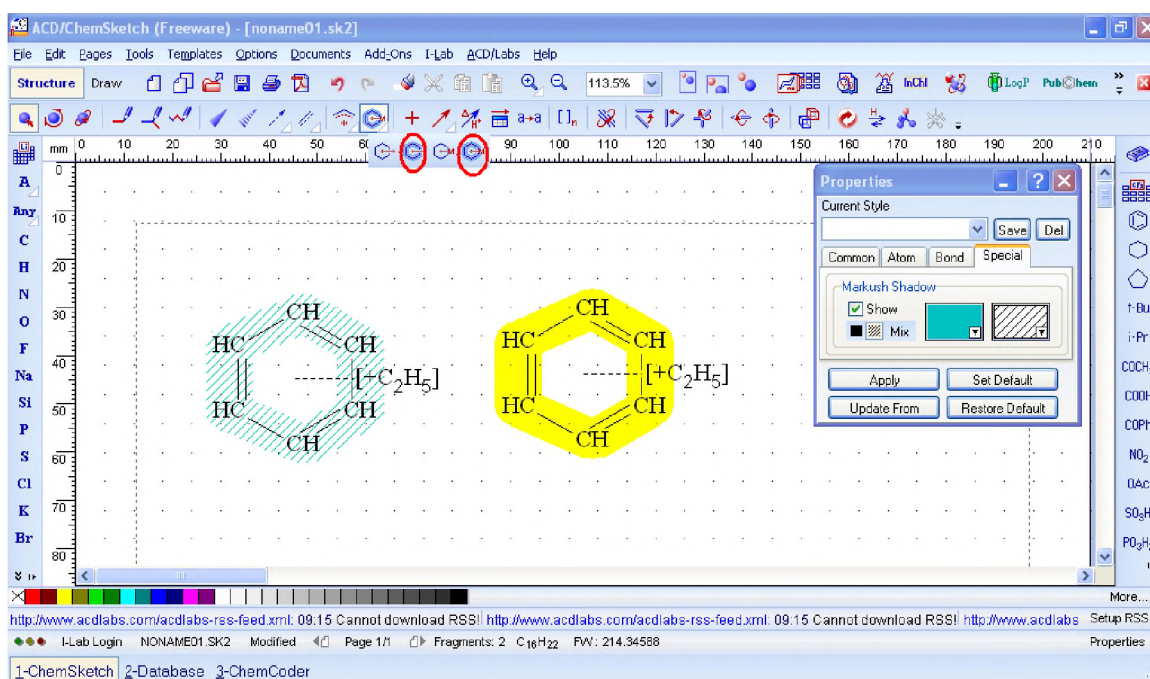
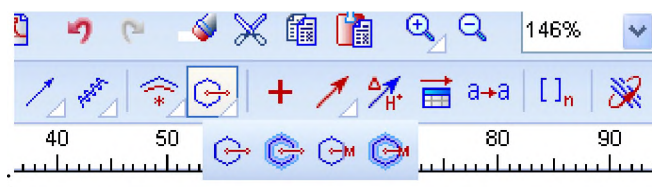


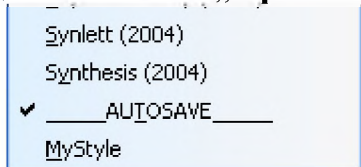
Рис.3.20. Налаштування кольору виділення фрагментів молекул



### 3.3. Створення стилів користувача

Для створення власного стилю необхідно завантажити найбільш приданий із стилів (влаштованих, користувача, або “AUTOSAVE”). Переналаштувати його, використовуючи вікно „Properties”, ввести назву стилю (наприклад, “MyStyle”) рис. 3.21. та натиснути кнопку “Save”. З’явиться повідомлення “Save user-defined style “MyStyle””; щоб записати стиль, необхідно натиснути кнопку „Ok”.

Після цього в меню „Option” > “Set Structure Draw Style” буде додано



НОВИЙ СТИЛЬ:

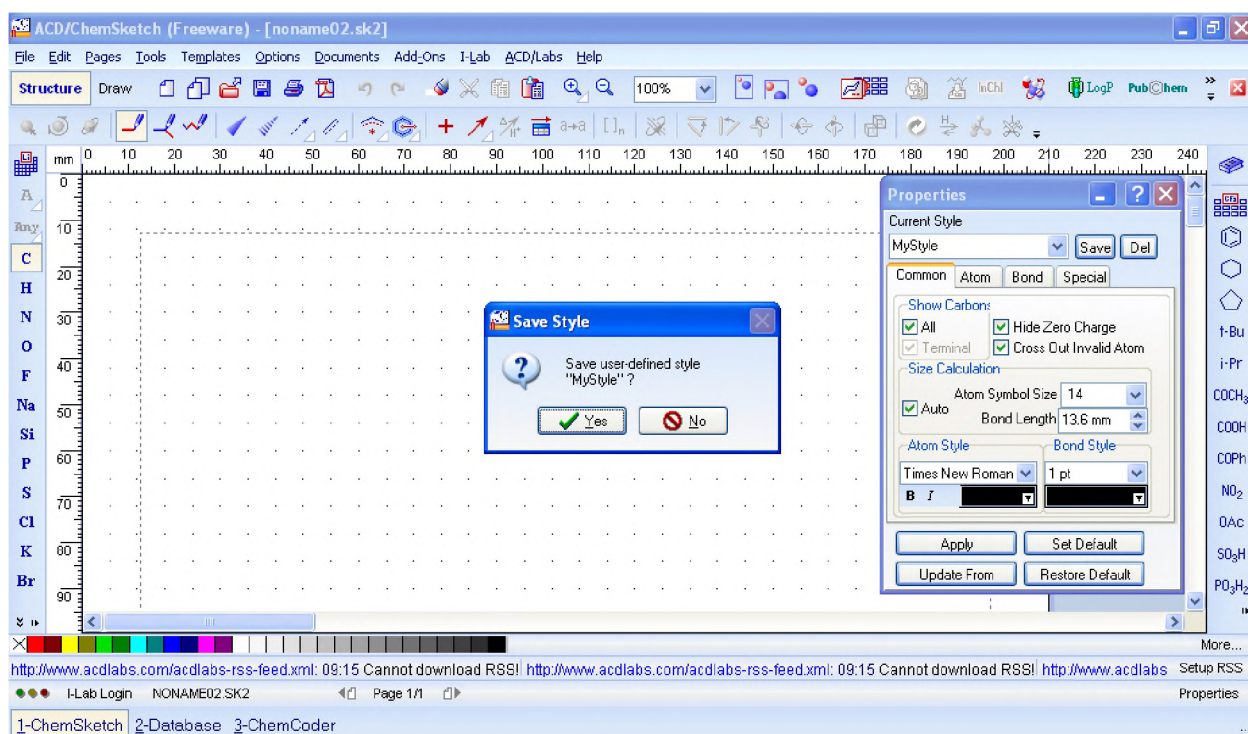


Рис. 3.21. Створення власного стилю.

## 4. Панель „Preferences” („Надавати перевагу”) та інші налаштування

Панель „Preferences” (надавати перевагу) має чотири вкладки (рис.4.1):

- „General” – основна;
- “Structure” – структура;
- “Reaction” – реакція;
- “Clean” – очистка.

### 4.1. Панель „Preferences” вкладка „General”

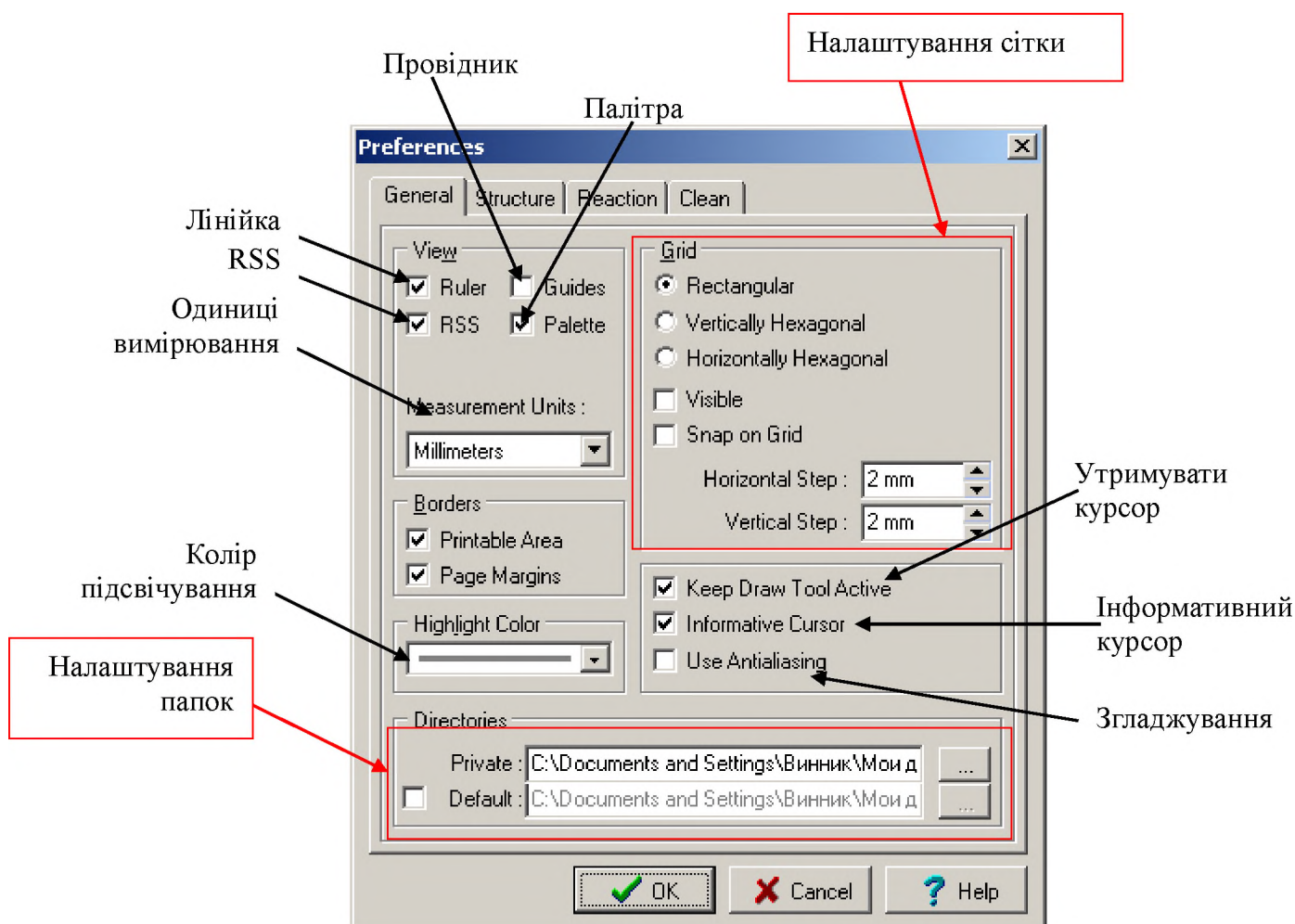


Рис. 4.1. Панель „Preferences” вкладка „General”

Використовуючи групу “View”, можна налаштувати зовнішній вигляд вікна:

- відображати лінійку – „Ruler” (рис.4.1, 4.2);
- показувати палітру – „Palette” (рис.4.1, 4.2);
- при увімкненні опції „RSS” відображається стрічка RSS (доступ до Інтернет ресурсів) (рис.4.1, 4.2);
- при увімкненні опції “Guides” відображається положення „миші” на





лінійках.

Група „Grid” дозволяє налаштувати сітку:

- „Rectangular” – в клітинку;
- „Vertical Hexagonal” – вертикальна гексагональна;
- „Horizontally Hexagonal” – горизонтальна гексагональна;
- горизонтальний крок сітки налаштовується опцією „Horizontal Step”;
- тільки при увімкненні опції „Visible” сітка відображається;
- вертикальний крок сітки налаштовується опцією „Vertical Step”;
- при увімкненні опції „Snap On Grid” елементи формул будуть прив’язуватися до сітки.

Увімкнення опцій „Show Grid” – відображати сітку, „Snap On Grid” – прив’язувати до сітки, „Show Palette” – показувати палітру, „Show RSS” – показувати RSS вмикаються також із меню „Option”.

При увімкненій опції „Informative Cursor Pointer” буде відображатися зміщення об’єктів у Декартових координатах.

При вимкненні опції „Keep Draw Toll Active” в режимі малювання, наприклад еліпса () , чи іншої фігури після відпускання клавіші миші автоматично буде вибрано інструмент „Select/Move/Resize” ().

При увімкненій опції „Keep Draw Toll Active” залишиться активним обраний інструмент ().

В Групі „Border” містяться опції, що вмикають відображення полів на листі („Page Margins”) та область, що може бути виведена на принтер „Printable Area”.

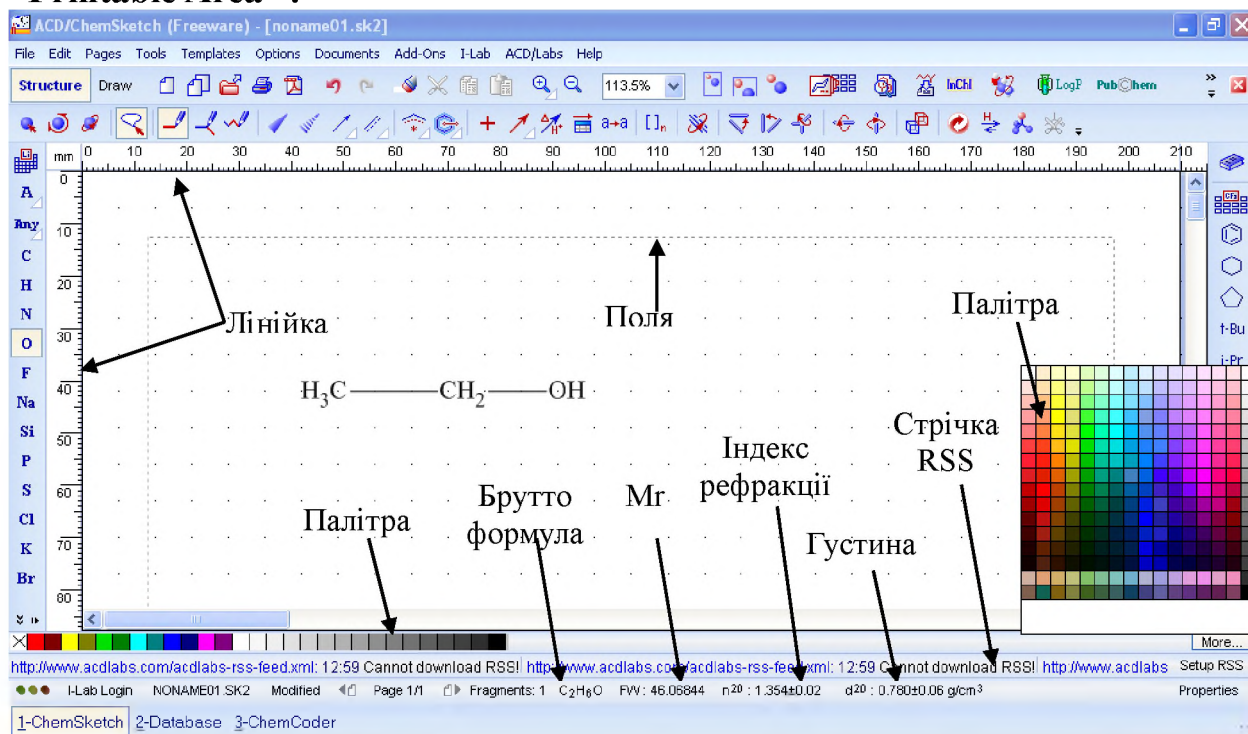


Рис. 4.2. Вікно ChemSketch

## 4.2. Панель „Preferences” вкладка „Structure”

Панель (рис. 4.3) дозволяє налаштувати спосіб написання структур.

Група **“Fixed ”** (фіксовані) включає дві опції:

- **“Bond Angle ”** – фіксований кут (кратний 15°);
- **“Bond Length ”** – фіксована довжина зв’язку (кратна вказаній).

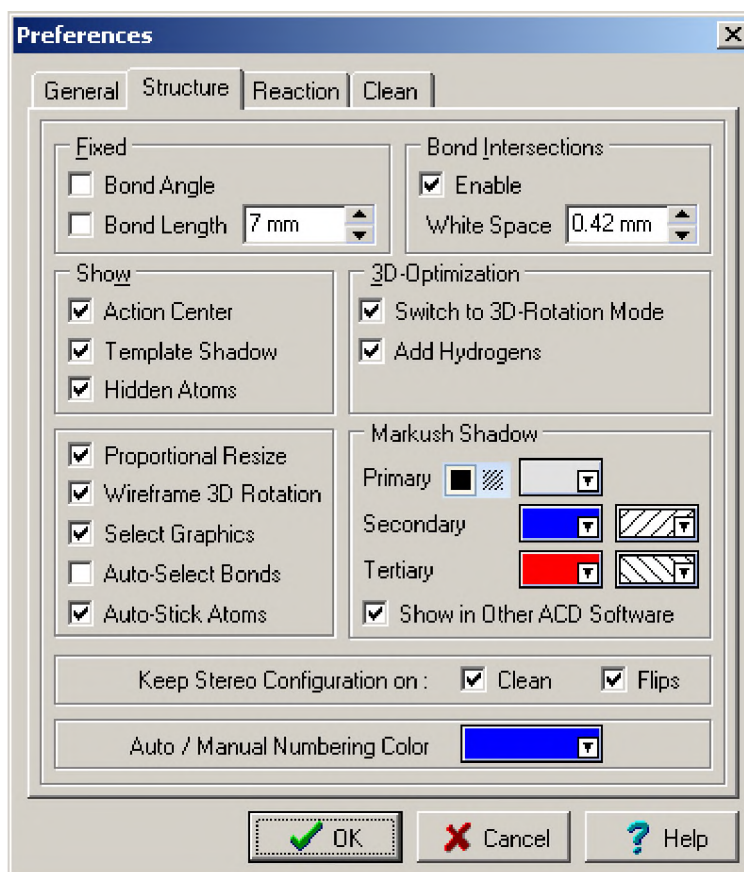


Рис. 4.3. Панель „Preferences” вкладка „Structure”

При увімкненій опції **„Snap On Grid”** (вкладка **„General”**) група **“Fixed ”** неактивна, оскільки елементи формули прив’язуються до сітки.

Група **“Bond intersection”** включає налаштування для зв’язків, що перетинаються. При увімкненні опції **„Enable”** між зв’язками, що перетинаються, буде пробіл величина якого визначається опцією **„White Space”** (рис.4.3, 4.4).

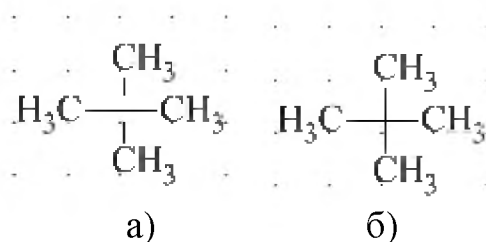



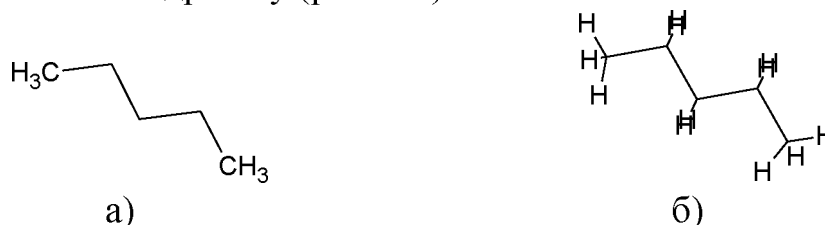





Рис. 4.4 Способи відображення зв’язків, що перетинаються:  
а) **„Enable”** – увімкнено, **„White Space”**= 1,44мм б) **„Enable”** – вимкнено

Група **“3D Optimization”** (3D оптимізація) містить дві опції (рис. 4.3):

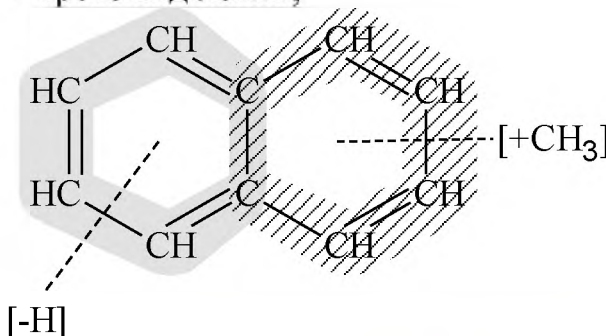
- **“Switch to 3D-Rotation Mode”** - при увімкненні цієї опції після оптимізації () буде активізовано інструмент для 3D обертання (, **“3D Rotation”**).
- При увімкненні опції **„Add Hydrogen”** та при оптимізації () будуть додані атоми Гідрогену (рис. 4.5).





**Рис. 4.5 Молекула пентану після оптимізації**  
**а) при вимкненій опції „Add Hydrogen”**  
**б) при увімкненій опції „Add Hydrogen”**

Група **“Markush Shadow”** містить налаштування для виділення при використанні таких команд як **„Added Or Removed Fragment With Shadow”** () (рис.4.6), або **“Markush Bond With Shadow”** () (доступ через кнопку  верхньої панелі).

- **“Primary”** - перше виділення;
- **“Secondary”** - друге виділення;
- **“Tertiary”** - третє виділення;



**Рис.4.6. Застосування інструменту „Added Or Removed Fragment With Shadow”:**  - перше виділення;  - друге виділення


Опція **„Proportional Resize”** – вмикає/вимикає режим пропорційного розтягування – при зміні розміру молекули змінюється розмір шрифту.

Опція **“Wireframe 3D Rotation”** (каркасне 3D обертання) – визначає, яким чином буде відображатися структура при обертанні. При увімкненні опції при 3D обертанні подвійні та потрійні зв’язки будуть відображаються як одинарні.

При увімкненій опції **„Select Graphic”** стає можливим виділення графічних об’єктів, переміщення, зміна їх розміру.

При увімкненій опції **“Auto Select Bond”** при виділенні двох атомів біля зв’язку (виділення здійснюється при натиснутій клавіші **SHIFT**) автоматично виділяється зв’язок між ними.

### 4.3. Панель „Preferences” вкладка „Reaction”

Група **“Character”** (надпис) вкладки **„Reaction”** (рис. 4.7) використовується для налаштування відображення символу „+” при написанні реакцій (інструмент  верхньої панелі).

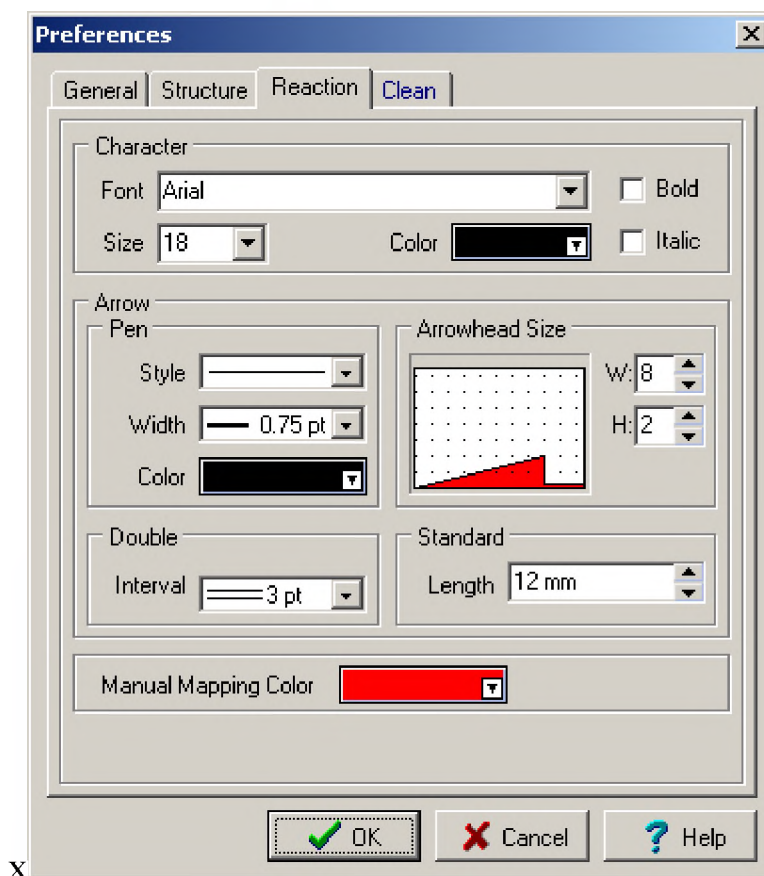
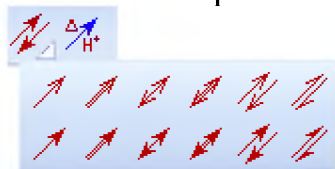


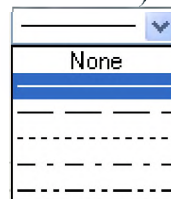
Рис. 4.7. Панель „Preferences” вкладка „Reaction”


Група **„Arrow”** дозволяє налаштувати вигляд стрілки рівняння реакції, які створюються за допомогою кнопки верхньої панелі **“Reaction Arrow”**:




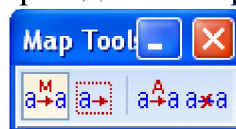
Група містить наступні функції:

- **“Style”** – стиль (суцільна, пунктирна та ін.) :





- **“Width”** – товщину стрілки;
- **“Interval”** – відстань між подвійними стрілками (  );

- “Length” – довжину стрілки;
- “Manual Mapping Color” – колір надписів карти реакції ():



#### 4.4. Панель „Preferences” вкладка „Clean”

У вкладці “Clean ” (рис.4.8.) вибираються методи очистки формули при виконанні команди “Clean” (). При виборі декількох методів способи очистки циклічно перебираються при натисканні кнопки “Clean” ().

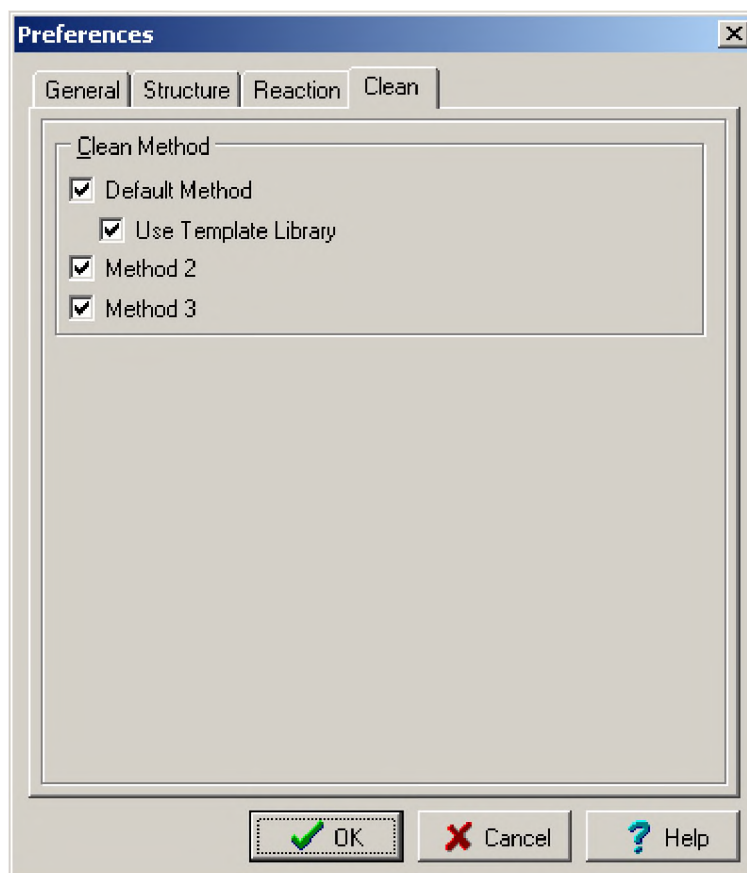



Рис. 4.8. Панель „Preferences” вкладка „Clean”



## 5. Застосування вікна “Template Window” (“Вікно шаблонів”) для швидкого набору формул

### 5.1. Застосування баз готових об'єктів для швидкого набору формул

Вікно “Template Window” може бути відрито із меню “Templates” > “Template Window” або шляхом натискання на кнопку  (рис. 5.1) на панелі верхній панелі, а також за допомогою клавіші швидкого доступу „F5”.

Вибрати тип даних (тип сполук, чи малюнків) можна у правому верхньому списку (рис. 5.1).

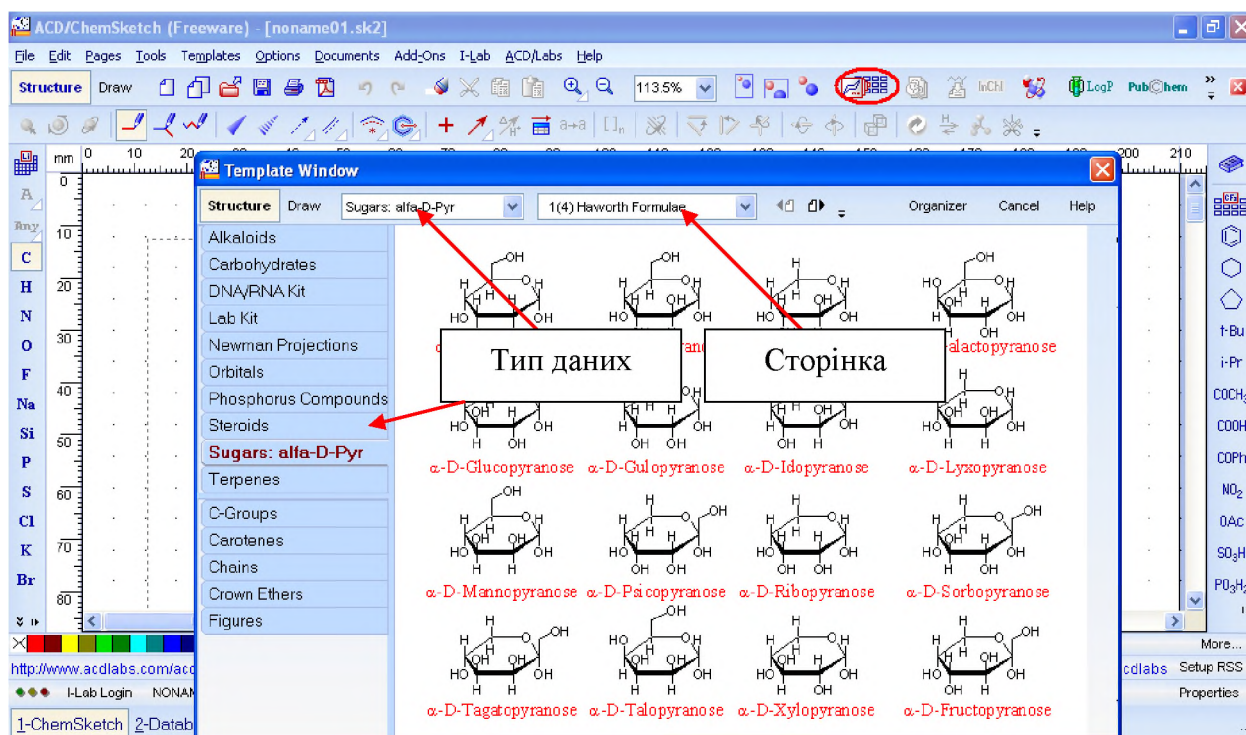


Рис. 5.1. Вікно “Template Window”

Шаблони поділені на сторінки. Так, відкриття сторінки №1 бази сполук „Sugar: Alfa-D-Pyr” вмикає доступ до молекул моносахаридів, зображених у стилі наведеному на рис.5.1, а перехід до сторінки №2 дозволяє вивести формули сполук у вигляді, зображеному рис.5.2а, а до сторінки №4 – рис.5.2б.

Шаблони, що найбільш часто використовуються, будуть відображатися у вигляді кнопок в лівій частині вікна (рис.5.1). Кнопки також можна налаштувати за допомогою органайзеру.



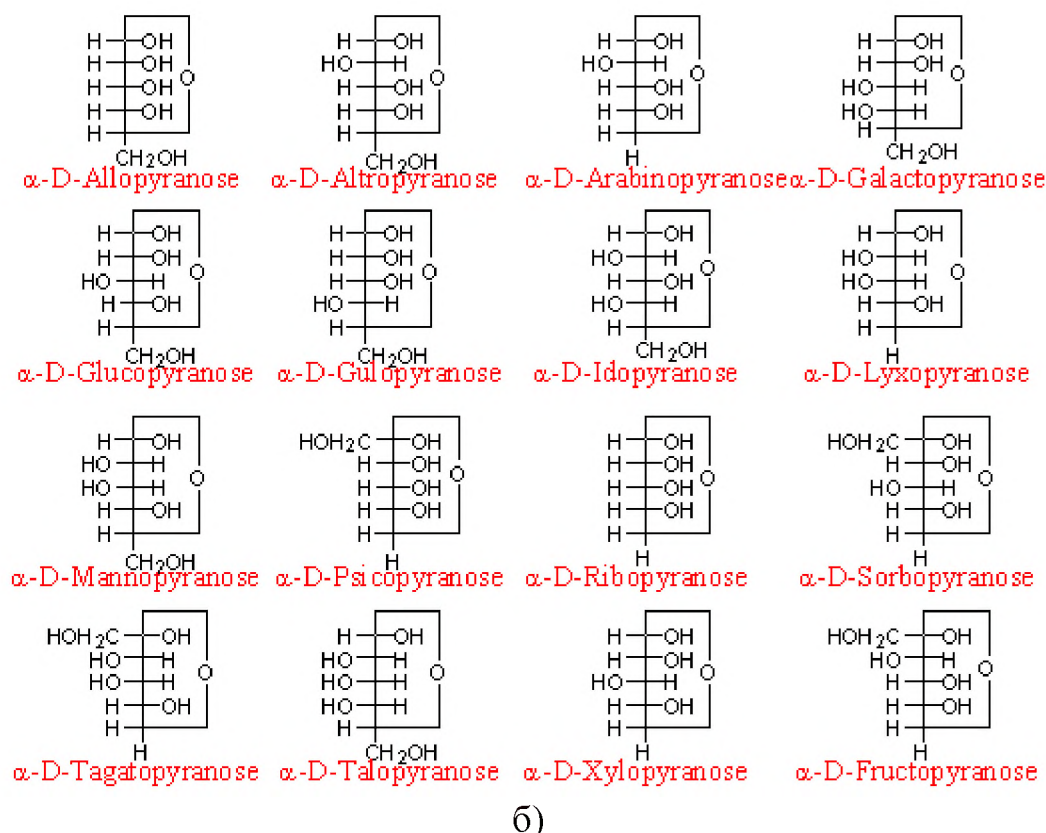
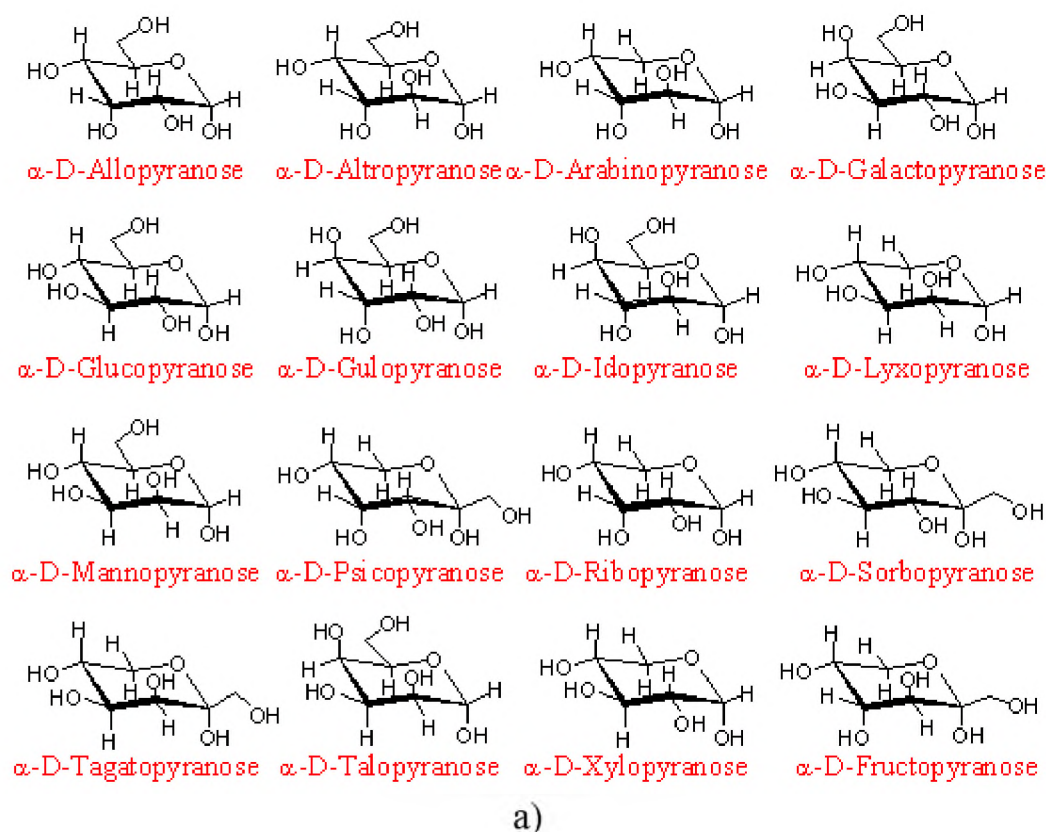


Рис. 5.2. Шаблон „Sugar: Alfa-D-Pyr”,  
а) сторінка №2, б) сторінка №4

Слід зауважити, що шаблони даних готових об'єктів містять не тільки формули, а й малюнки (рис. 5.3).

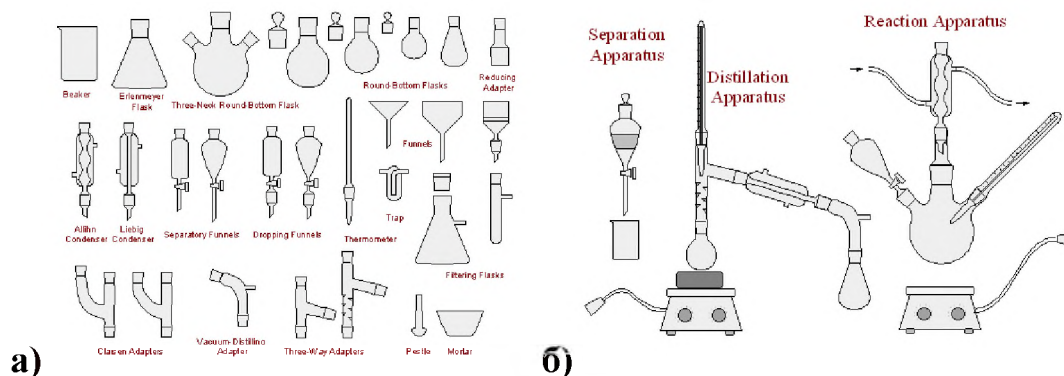


Рис. 5.3. Шаблон „Lab Kit”: а) сторінка №1, б) сторінка №2

Передбачено два режими копіювання формул **”Structure”** та **”Draw”**. В режимі **”Structure”** (кнопки верхньої панелі зліва) при копіюванні формули застосовуються стилі, використані в документі, а при копіюванні в режимі **”Draw”** модифікація стилів не відбувається – формула має такий же вигляд, як і в шаблонах об'єктів (рис.5.5).

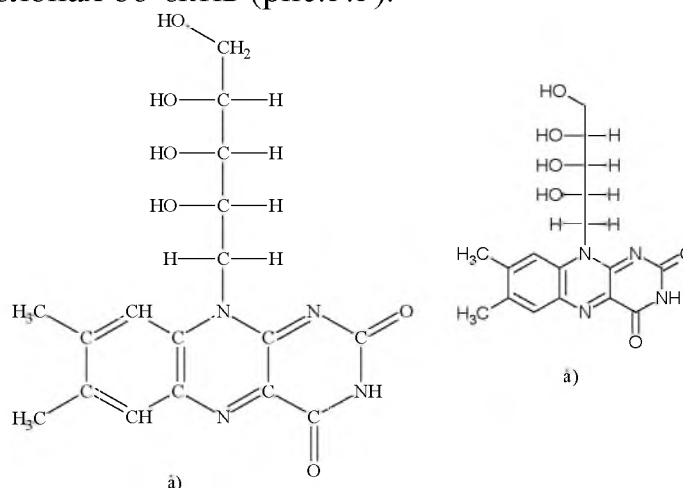


Рис.5.4. Режими копіювання: а) **”Structure”** (застосовано власний стиль); б) **”Draw”** (застосовано стиль бази даних)

Для запуску вікна упорядкування баз використовується вікно **„User Template Window Organizer”**. Кнопка для запуску цього вікна (**Organizer**) знаходиться у верхній правій частині вікна **“Template Window”** (рис.5.1). При запуску вікна **„User Template Window Organizer”** (рис.5.5) відображають всі бази даних. **Вибрані бази** даних відображаються у вигляді кнопок швидкого доступу у правій частині вікна **“Template Window”** (рис.5.1).

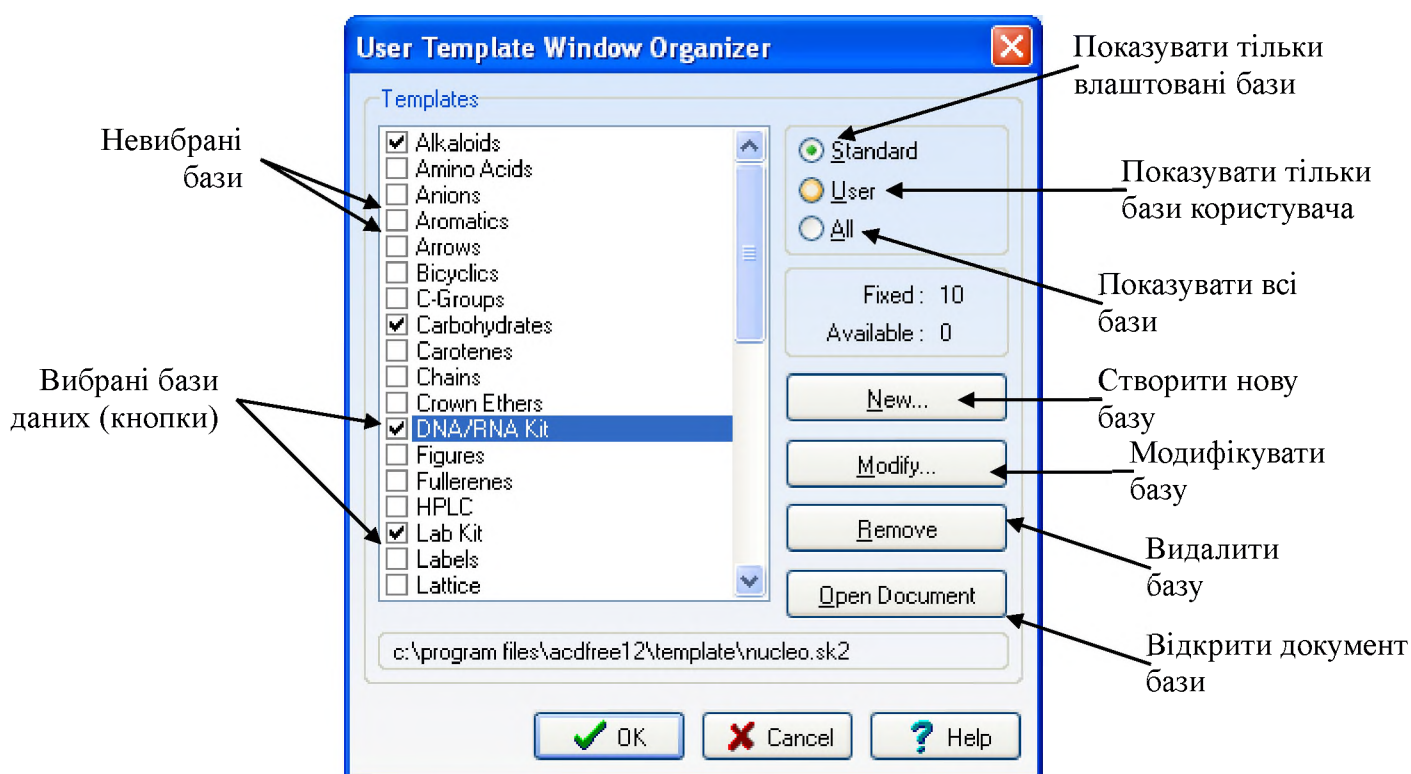


Рис. 5.5. Вікно „User Template Window Organizer”

## 5.2. Створення власних баз готових об'єктів (Template Organizer)

Для того, щоб, наприклад, створити базу даних дисахаридів, необхідно спочатку створити новий документ (“disaccharide.sk2”). Поділимо всі дисахариди на відновлюючі та невідновлюючі. Таким чином, наша база буде включати дві сторінки. Назвемо першу сторінку: виконаємо команду „Page”>”Rename” та назвемо сторінку (рис.5.6):

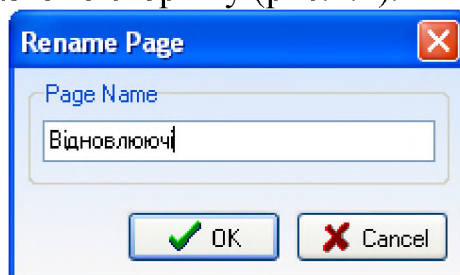


Рис. 5.6. Вікно „Rename Page”

Додаємо ще одну сторінку („Page”>”Insert”). Назвемо другу сторінку: („Page”>”Rename”). Введемо назву ”Невідновлюючі дисахариди”.

Повернемося до першої сторінки, виконаємо команду меню „Page”>”Previous” або натиснемо клавішу “PgUp”. Перехід між сторінками також можна здійснювати використовуючи нижню стрічку вікна (рис.5.7.):

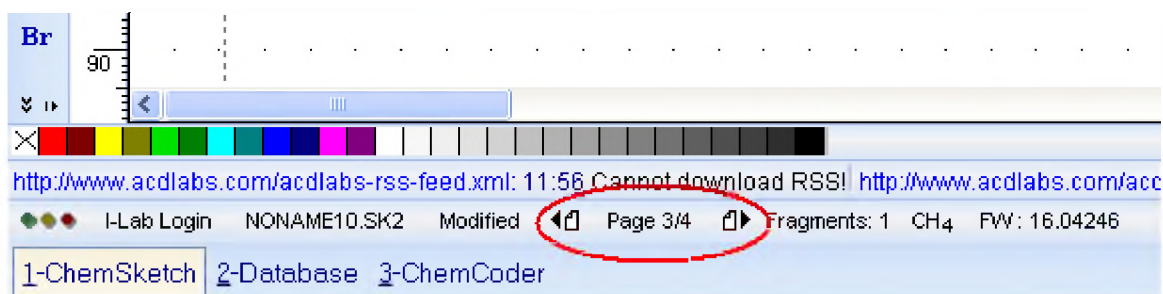



Рис. 5.7. Кнопки вибору сторінки на нижній стрічці вікна “ChemSketch”

Напишемо на першому листі відновлюючі дисахариди, а на другому – невідновлюючі. Збережемо шаблони. Для запобігання втрати власних шаблонів рекомендується зберігати шаблони в окремій папці не на системному диску.

Для приєднання власної бази запустіть “**Template Window**” (  ), а потім із відкритого вікна запустіть вікно органайзера (рис.5.1). Виберіть опцію „User”, натисніть кнопку „New”. Введіть назву бази даних „Дисахариди”, відкрийте документ “disaccharide.sk2” (рис. 5.8). Натисніть кнопку „OK”.

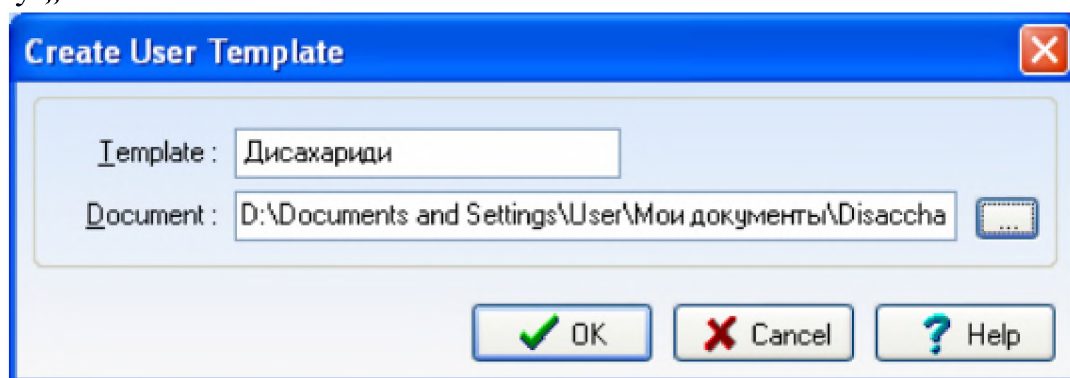


Рис. 5.8. Приєднання шаблонів користувача

### 5.3.Завдання для самоконтролю

1. Запишіть формули: мальтози, целобіози, лактози, сахарози.
2. Створіть власну базу дисахаридів.
3. Намалюйте установку для перегонки із водяною парою.
4. Намалюйте установку для отримання хлоридної кислоти сульфатним методом та додайте до власних баз даних.
5. Створіть власну базу графічних об’єктів та додайте установку для перегонки з водяною парою до баз готових об’єктів.



## 6. Застосування ChemBasic для швидкого набору формул

**ChemBasic** – це мова програмування, що використовується в **ChemSketch**. Документація на програмний засіб відкривається через меню “**ChemSketch „Help”>”ChemBasic Tutorial”**”.

Програмний засіб має 21 готову програму, які суттєво полегшують роботу користувача, наприклад, набір формул полінуклеотидів, поліпептидів, полісахаридів. Ці програми знаходяться в папці CHEMBAS (C:\Program Files\ACDFREE12\EXAMPLES\CHEMBAS\ ).

### 6.1. Налаштування панелі ChemBasic

Щоб використати функції ChemBasic, треба налаштувати панель ChemBasic. Необхідно відкрити вікно “**ChemBasic Organizer**” (рис.6.1.). Це можна зробити із меню “**Option”> ChemBasic Organizer**”.

Виберемо опції (рис.6.1.) “**Peptide Builder**” – програма для написання поліпептидів, “**Carbohydrate Builder**” – програма для написання полісахаридів та “**Nucleic Acid Builder**” – програма для написання полінуклеотидів. Натиснемо кнопку „OK”. З’явиться додаткова верхня панель з трьома кнопками



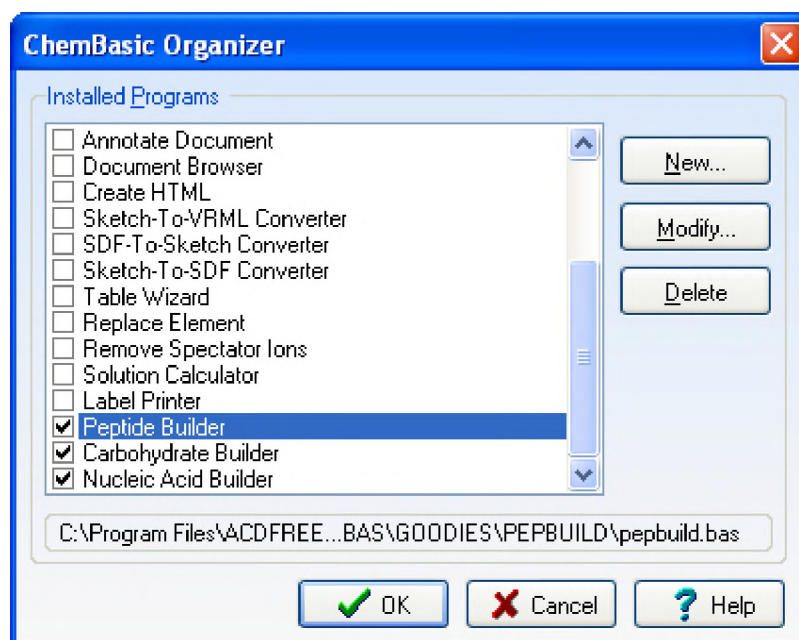


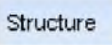


Рис.6.1. Вікно “ChemBasic Organizer”

### 6.2. Набір формул поліпептидів

Файл програми (PEPBUILD.BAS) та документація PEPTIDEBUILDER.PDF знаходиться в папці PEPBUILD (C:\Program Files\ACDFREE12\EXAMPLES\CHEMBAS\GOODIES\PEPBUILD).

Для застосування програми спочатку необхідно набрати формулу




пополіпептиду в текстовому полі. Для цього перемкніть програму в режим „Draw” використовуючи кнопку на верхній панелі  . Натисніть кнопку „Text” () на лівій панелі. Набір поліпептиду можна здійснювати використовуючи однолітерові символи або трьохлітерові символи (Таблиця 6.1.)

Таблиця. 6.1.

## Символьні позначення амінокислот

Амінокислота		Позначення	
Укр. назва	Анг.	1-літера	3-літери
Аланін	Alanine	A	Ala
Аргінін	Arginine	R	Arg
Аспарагін	Asparagine	N	Asn
Аспарагінова кислота	Aspartic acid	D	Asp
Цистеїн	Cysteine	C	Cys
Глютамінова кислота	Glutamic acid	E	Glu
Глутамін	Glutamine	Q	Gln
Гліцин	Glycine	G	Gly
Гістидин	Histidine	H	His
Ізолейцин	Isoleucine	I	Ile
Лейцин	Leucine	L	Leu
Лізін	Lysine	K	Lys
Метіонін	Methionine	M	Met
Фенілаланін	Phenylalanine	F	Phe
Пролін	Proline	P	Pro
Сермін	Serine	S	Ser
Треонін	Threonine	T	Thr
Триптофан	Tryptophan	W	Trp
Тирозин	Tyrosine	Y	Tyr
Валін	Valine	V	Val
Орнітин	Ornithine1	O	Orn

Наберемо формулу трипептиду (аланін-цистеїн-серин), використовуючи однолітерну символіку (ACS). Натиснемо на кнопку

„Peptide Builder”: . Буде відкрито вікно „Peptide Builder:Input Option” (рис. 6.2). Виберіть опції „SINGLE letter codes” – кодування однією літерою та “Use existing textbox on page” – використати текстове поле на сторінці.

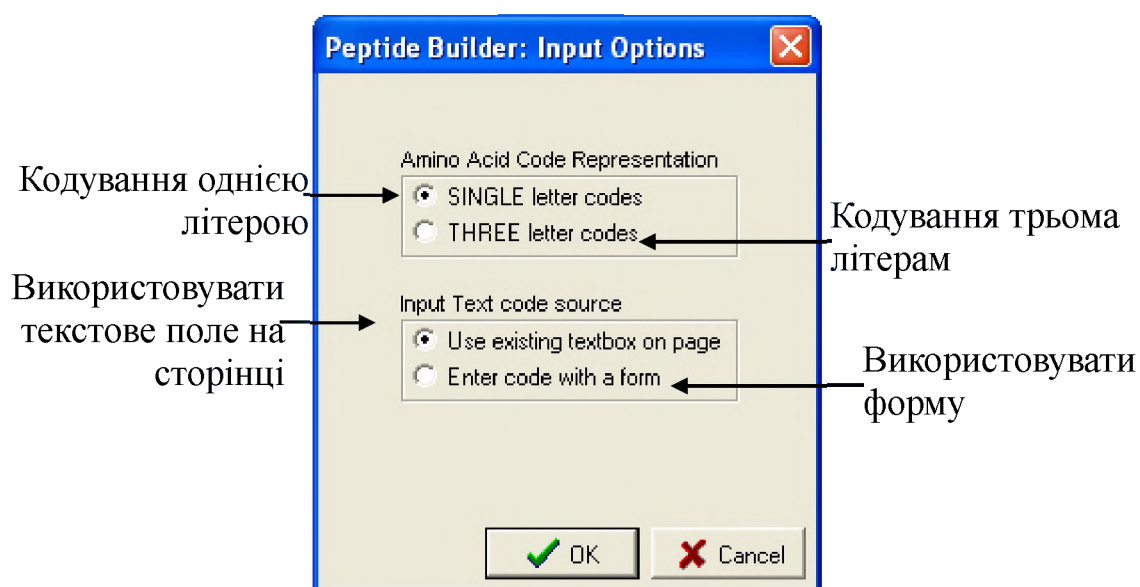
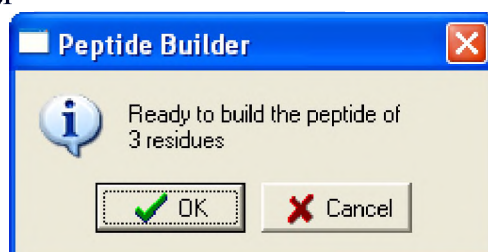
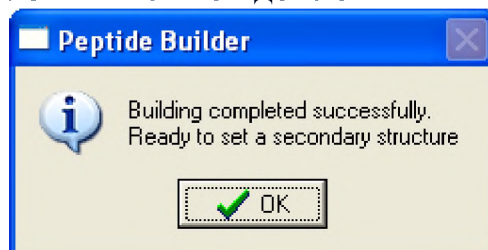


Рис. 6.2. Вікно програми PEPBUILD.BAS

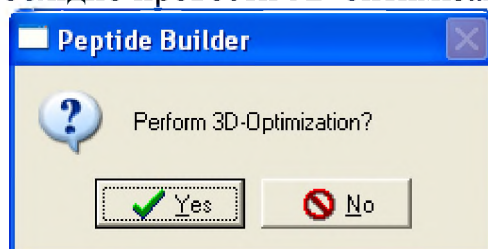
З'явиться повідомлення



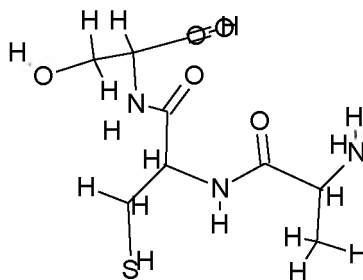
Натисніть кнопку „OK”. З'явиться повідомлення




Натисніть кнопку „OK”. З'явиться повідомлення „Perform 3D-Optimization?” – чи необхідно провести 3D оптимізацію?:

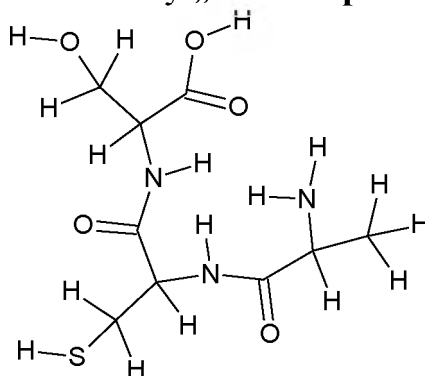


Проведіть оптимізацію, натиснувши на кнопку „Yes”. Після цього буде виведено формулу в правому верхньому кутку листа.



Виберіть інструмент  і помістіть формулу в потрібне місце. Якщо необхідне подальше упорядкування атомів, то виділіть формулу, перемкніть ПЗ в режим „**Structure**”.

Після декількох натискань на кнопку „**Clean Up Structure**” ().




Введення формули поліпептиду може бути здійснений зі спеціальної форми. Для цього в вікні „**Peptide Builder:Input Option**” (рис.6.2), необхідно вибрати опцію “**Enter Code With a Form**”. Буде виведено вікно (рис.6.3), в яке необхідно ввести формулу поліпептиду обов’язково однолітерним кодуванням.

Рис. 6.3. Форма для вводу формули поліпептиду

### 6.3. Набір формул ДНК та РНК

Для написання формул полінуклеотидів використовується програма “NUCLBLD.BAS”.

Спочатку необхідно відкрити вікно для написання цих формул – натиснути на кнопку  на панелі **ChemBasic**. Якщо буде запропоновано зберегти файл – зробіть це. Після цього відкривається вікно “**Nucleic Acid Builder**”( рис. 6.4).

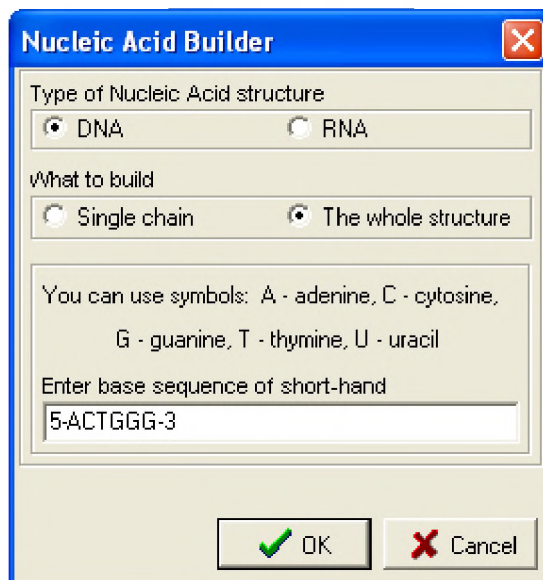
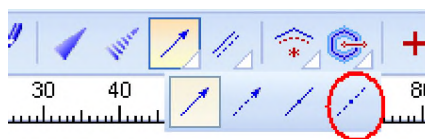


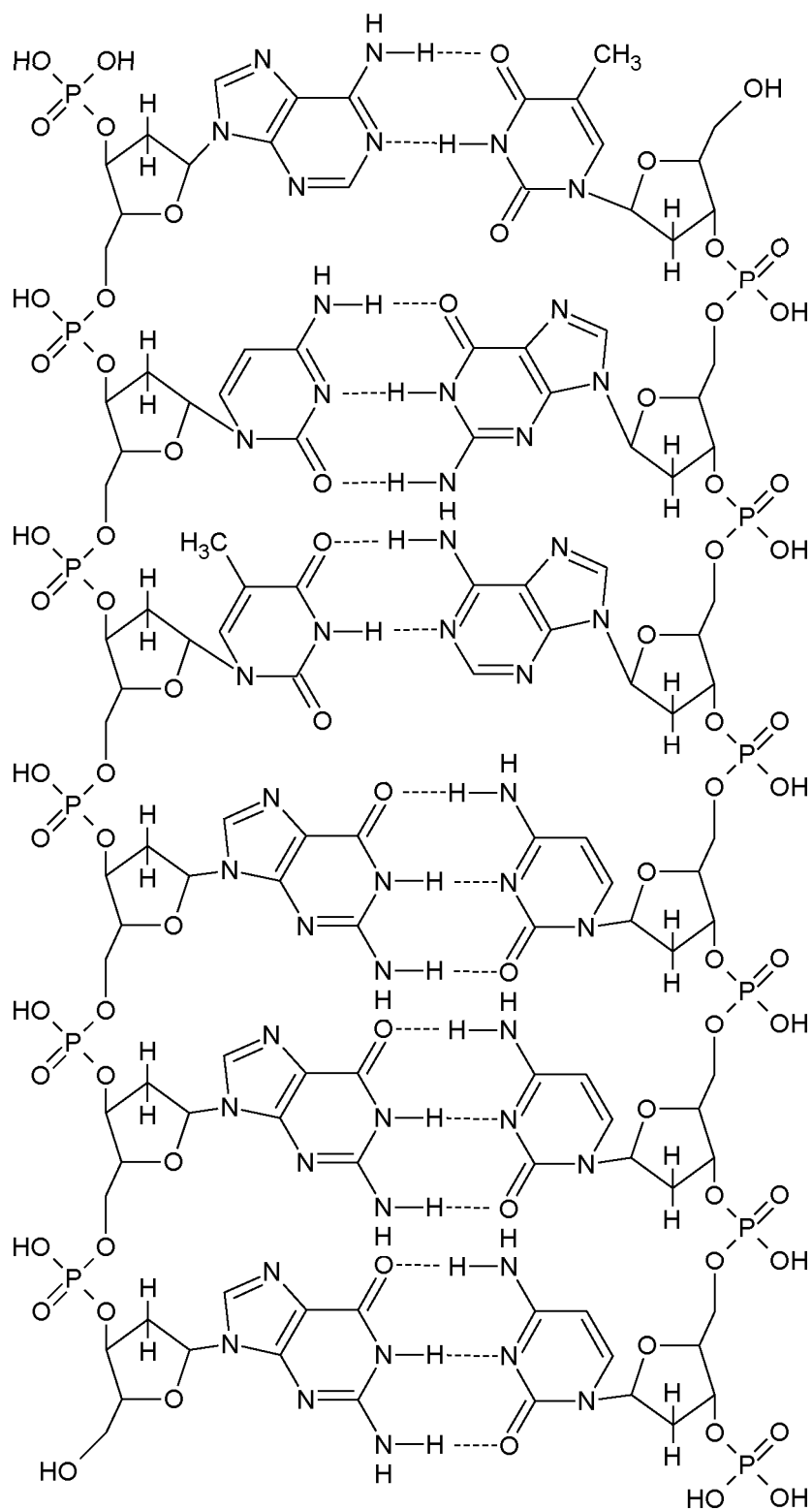
Рис. 6.4. Вікно програми NUCLBLD.BAS

Буде запропоновано написати молекулу ДНК (вибрано опцію “DNA”), у якої перший ланцюжок (ACTGGG) починається з фосфатної групи, приєднаної до п'ятого атома Карбону дезоксирибози і закінчується дезоксирибозою, де фосфат приєднаний до третього атома Карбону дезоксирибози. За замовчуванням вибрано опцію „**The whole structure**” – автоматично добудувати комплементарний ланцюг. Якщо вибрати опцію „**Single chain**”, то буде записано один ланцюг.

Наберемо необхідну комбінацію, наприклад „5-GGGTCA-3”, виберемо опції “DNA”, „**The whole structure**” (дописати комплементарний ланцюг). Натиснемо кнопку „OK”. Результат роботи програми наведено на рис. 6.5.

Нагадуємо, що до молекул РНК замість тиміну входить урацил. Якщо до молекули ДНК буде входити урацил, або до молекули РНК тимін, то програма видасть помилку IV. До молекули РНК також можна добудовувати комплементарний ланцюг. Водневі зв'язки, при необхідності, можна дописати використовуючи інструмент „**Coordinating [Dashed] Bond**”, що знаходиться на верхній панелі:





**Рис.6.5. Формула ДНК, записана за допомогою програми ChemBasic із застосуванням стилю „Normal”**

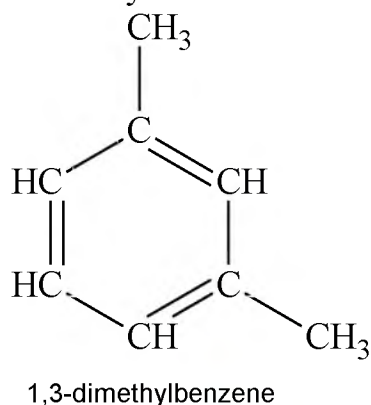


## 7. Застосування ACD/3D Viewer

### 7.1. Застосування ACD/3D Viewer для демонстрації молекулярних структур

Модуль **ACD/3D Viewer** може бути використаний для моделювання 3D структур, які можуть бути застосовані при оформленні хімічного тексту, посібників, комп'ютерної демонстрації молекулярних структур, в навчально-дослідницькій роботі.

Створимо формулу мета-ксилену:



Натиснемо на кнопку „3D-Viwer” (  ), з'явиться вікно **ACD/3D 3D-Viewer** (рис. 7.1).

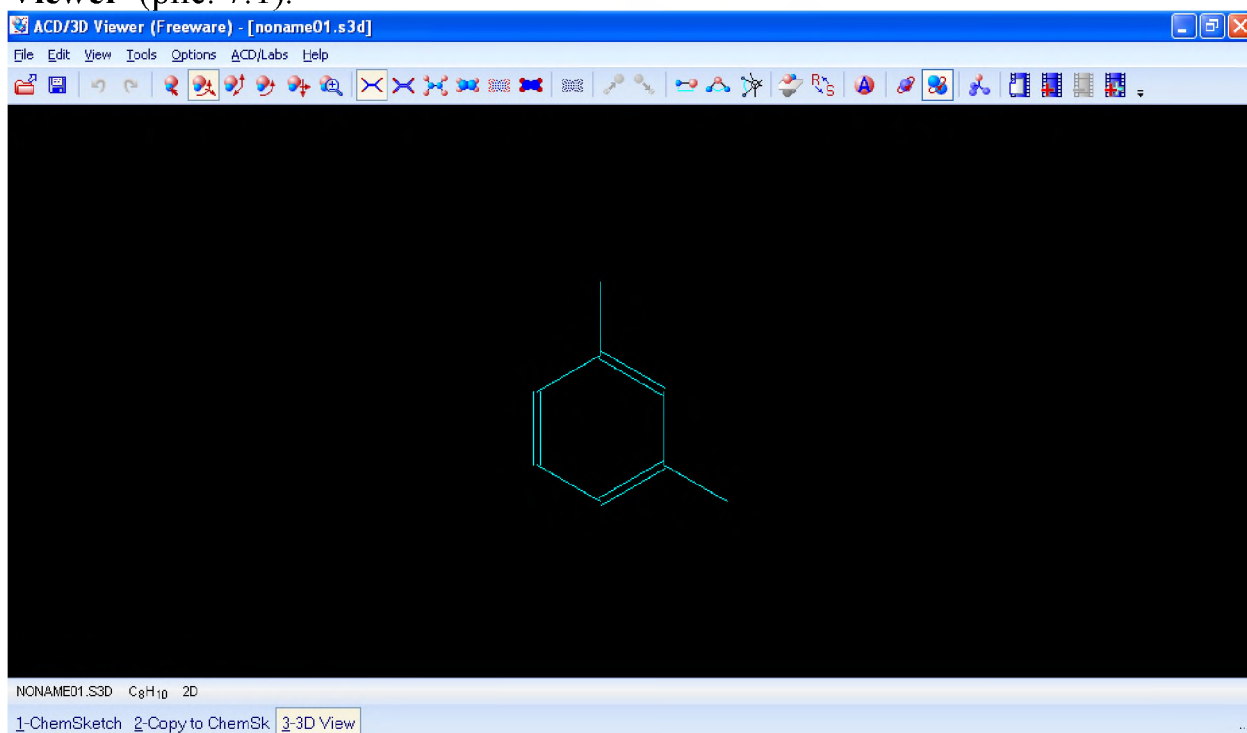


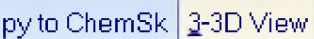

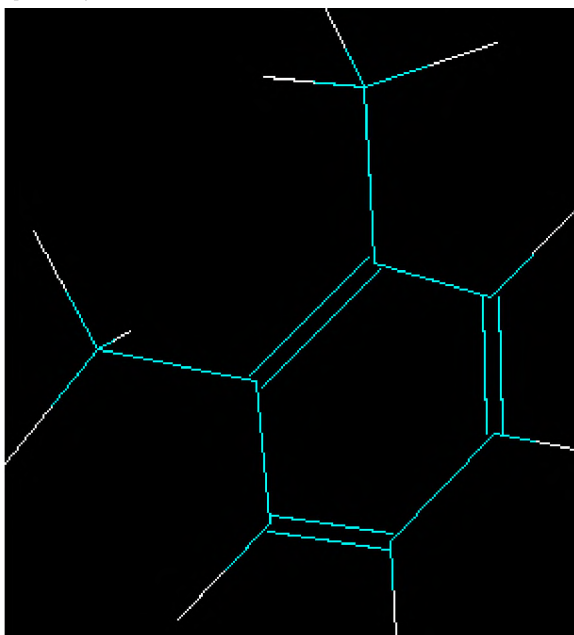



Рис. 7.1. Вікно ACD/3D

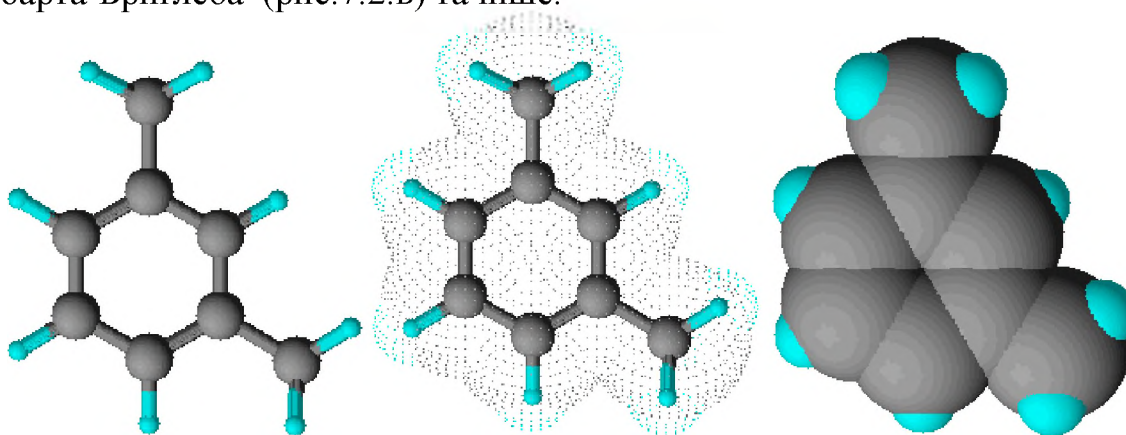
Застосовуючи кнопки **ChemSketch** та **3D-View** (    ), що знаходяться в правому нижньому кутку вікна, можна перемикатися між вікнами **ChemSketch** та **3D-View**.

Проводимо моделювання молекули – натиснемо на кнопку „3D-Optimization” (). Процес оптимізації відбувається швидко, оскільки алгоритм обчислень побудований на принципах молекулярної механіки (Molecular Mechanics). Після закінчення моделювання виводиться трьохвимірне зображення:




**Рис. 7.2.** Молекула мета-ксилолу після моделювання („дротяна”)

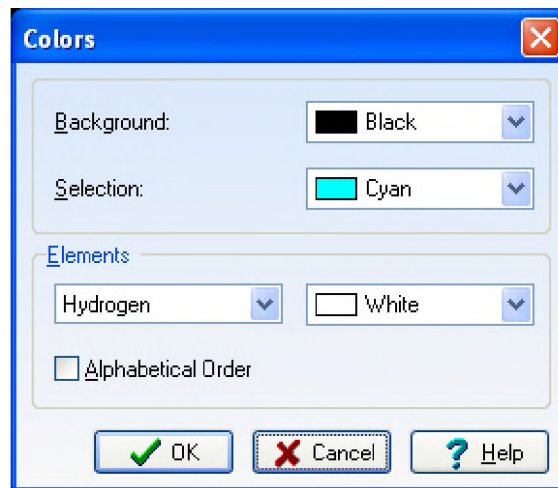
Використовуючи кнопки () на верхній панелі (рис.7.1.) можна змінювати спосіб відображення: кулестержнева (рис.7.3.a,b), Стюарта-Бриггеба (рис.7.2.в) та інше.



**Рис. 7.3.** Молекула мета-ксилену після моделювання:

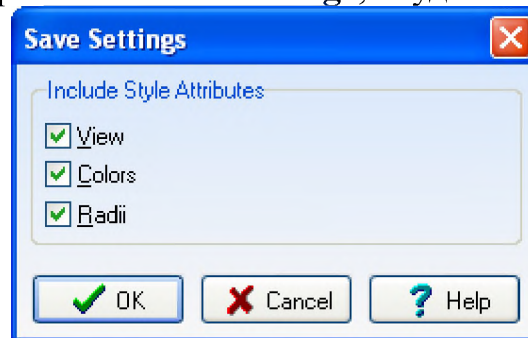
а) кулестержнева, б) кулестержнева із відображення точками діаметрів атомів, в) Стюарта-Бриггеба

Після встановлення програмного засобу, за замовчуванням фон екрану чорний, що є не дуже зручно, особливо, коли дані копіюються до документу. Для того, щоб налаштувати фон екрану, кольори атомів, колір виділення необхідно відкрити вікно “Color” (рис.7.4.) – натиснути на кнопку: .

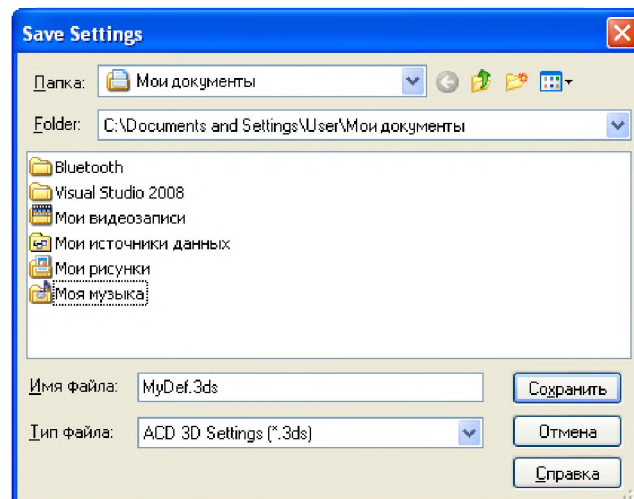


**Рис. 7.4. Вікно для налаштування кольорів: фону, атомів, виділення**

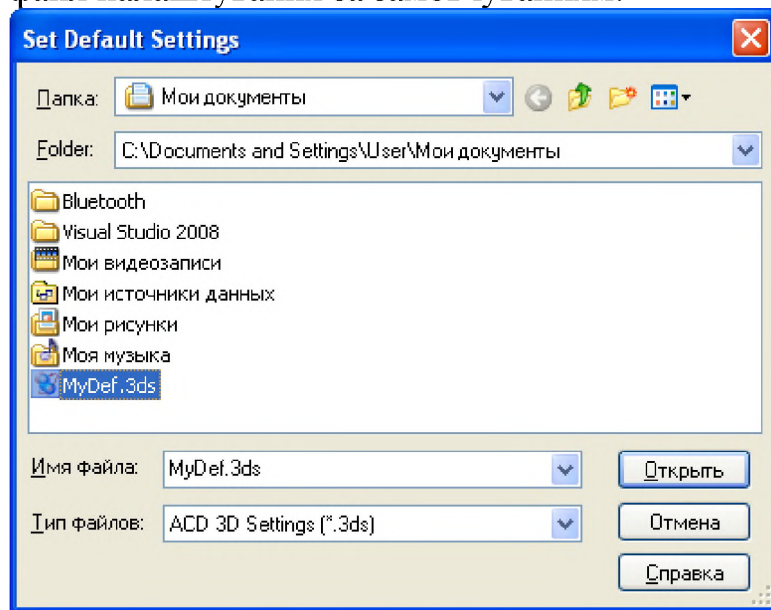
Налаштування можна зберегти. Для цього необхідно через меню виконати команду „**Option**”> “**Save Setting**”, буде виведено повідомлення:





Необхідно вибрати шлях для збереження файлу та натиснути кнопку “Сохранить”:



Для того, щоб записані налаштування використовувалися за замовчуванням, необхідно через меню виконати команду „**Option**”> „**Save Default Setting**” та встановити файл налаштування за замовчуванням:



Відновити початкові налаштування можна, виконавши команду „**Option**”> „**Restore Default Setting**”.


Обертання моделі може здійснюватися як в ручному режимі – для цього використовуються кнопки: , так і в автоматичному – за допомогою кнопок . Остання кнопка автоматично також змінює стиль відображення молекули при обертанні.



Переміщення та зміна розміру здійснюється маніпулятором „миша” після натискання на кнопки  та  відповідно.

Малюнок можна скопіювати в буфер обміну, виконавши через меню команду: „**Edit**” > „**Copy**” або натискання клавіш **Ctrl+C**.

Малюнок зберігається в різних форматах (\*.s3d, \*.mol, \*.bmp, \*.gif та ін.), після уиконання команди: „**File**”> „**Save**” (клавіша **F2**) або „**File**”> „**Save As**” (клавіші **Shift+F2**).

## 7.2. Застосування ACD/3D Viewer для визначення геометричних параметрів молекул

Геометричні параметри молекули обчислюються після натискання на кнопку „**3D-Optimization**” ().

Для визначення довжин зв’язків необхідно натиснути кнопки „**Select Atom**”  та „**Bond Length**” . Підвести маніпулятор „миша”, до першого атома (обов’язково почекати доки буде виведено координати атома, наприклад Н #8 X:-1.85 Y:-0.47 Z:0.52) і зробити клік. Атом буде виділено (за замовчуванням зеленим кольором). Після цього підвести маніпулятор до другого атома, почекати доки буде виведено координати і зробити клік. Після цього буде виведено вікно (рис.7.4).

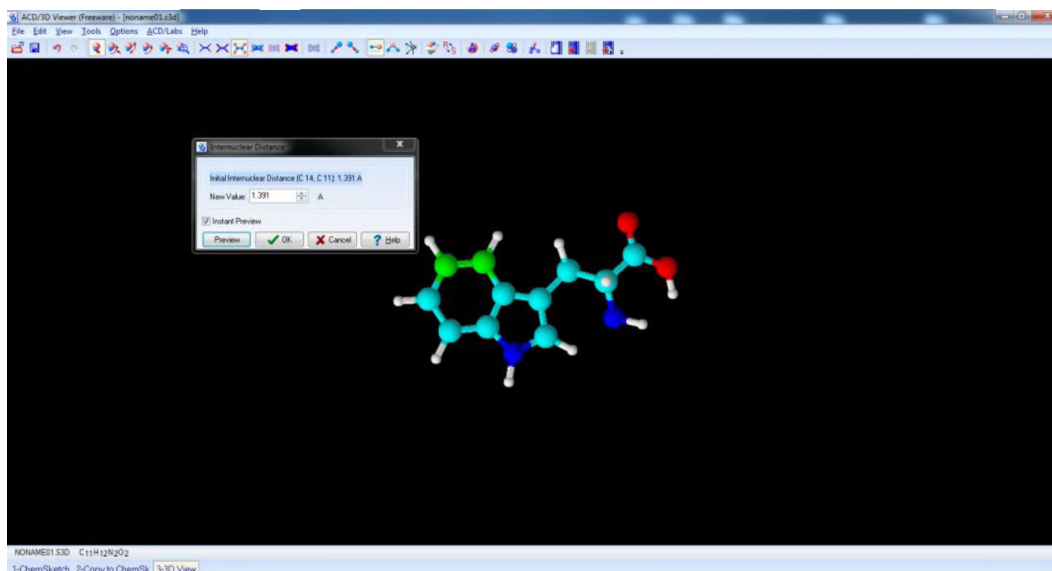
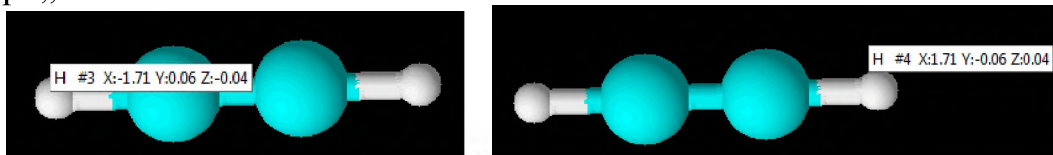


Рис. 7.4. Визначення відстаней між атомами

Для визначення геометричних розмірів молекули необхідно виділити два крайніх атома і виконати аналогічні операції.

Можна також визначити розміри молекули на основі координат крайніх атомів. Спочатку визначаємо координати крайніх атомів підводячи до них курсор „миші”:




Бачимо, що атом №3 (H) розміщено за координатою ( $X=-1.71\text{Å}$ ,  $Y=0,06\text{Å}$ ,  $Z=-0,04\text{Å}$ ), атом №4 (H) – ( $X=1.71\text{Å}$ ,  $Y=-0,06\text{Å}$ ,  $Z=0,04\text{Å}$ ).  $d = \sqrt{(x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2 + (z_1 - z_2)^2}$ . Для полегшення розрахунків можна скористатися безкоштовним ПЗ SMATHStudio. Цей програмний засіб можна знайти на офіційному сайті розробників: <http://ru.smath.info>:

$x1 := -1,71$	$x2 := 1,71$
$y1 := 0,06$	$y2 := -0,06$
$z1 := -0,04$	$z2 := 0,04$
$d := \sqrt{(x1 - x2)^2 + (y1 - y2)^2 + (z1 - z2)^2}$	
$d = 3,423$	

отримуємо: довжина зв'язку в молекулі ацетилену:  $3,423\text{Å}$  ( $0,3423\text{нм}$ ).



Для визначення кутів між зв'язками необхідно натиснути на кнопку "Angle"  (рис.7.5). Підвести маніпулятор „миша” до першого атома та зробити клік, потім до другого та зробити клік і нарешті до третього і зробити клік. Атоми будуть виділені та виведено вікно (рис.7.5).

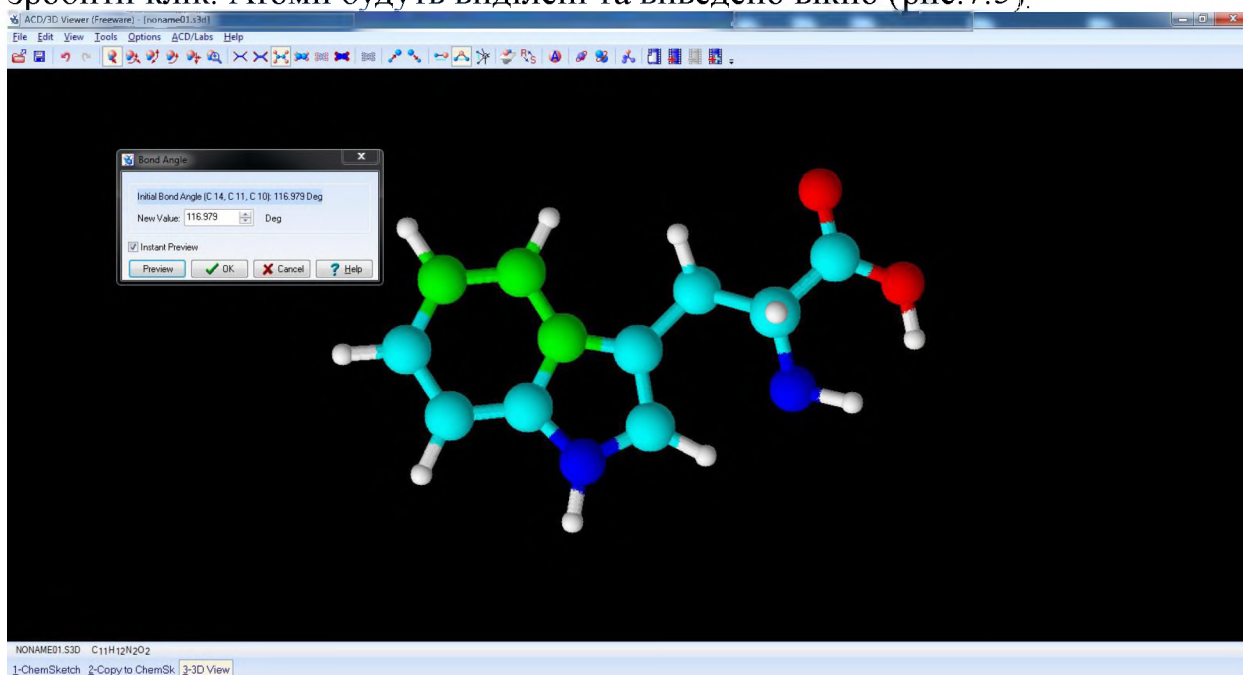
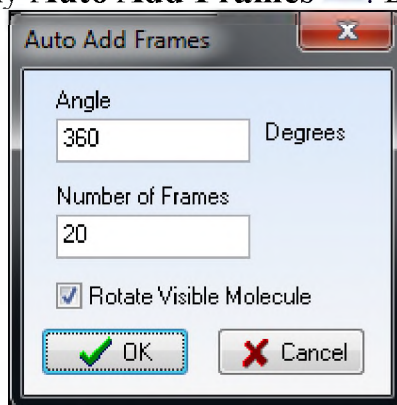


Рис. 7.5. Визначення кутів між зв'язками

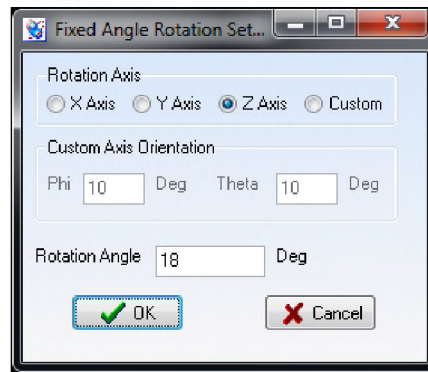
### 7.3. Створення анімацій


Натиснемо на кнопку **Auto Add Frames** . Буде відкрито панель:



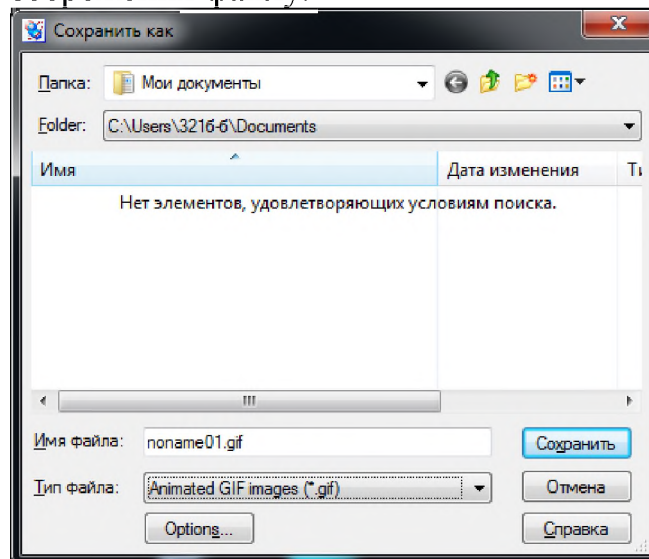
Виставимо параметр "Angle" (кут) 360, а параметр "Number of Frames" (кількість кадрів) 120. Натиснемо кнопку . Зачекаємо доки не буде записано 120 кадрів. Кількість записаних кадрів відображається в нижньому лівому кутку вікна (параметр „Frames”). Змінимо стиль відображення молекули (розділ 7.1.) та запишемо ще 120 кадрів.

Для зміни осі обертання виконаємо команду: **Option > Fixed Angle Rotation**. Буде відкрито вікно:




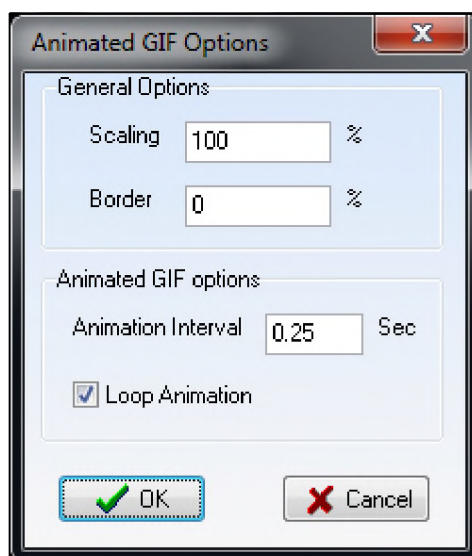
Змінимо опцію “**Rotation**” та натиснемо кнопку . Запишемо ще 120 кадрів анімації.


Збережемо анімацію виконавши команду меню **File > Save As**. Відкриється вікно збереження файлу:





Виберемо тип файлу **Animated GIF images** та збережемо його.

Перед збереженням файлу можна масштабувати анімацію (“**Scale**”), встановити ширину лінії рамки (“**Border**”), перевизначити інтервал програвання кадрів (“**Animation Interval**”) та визначити чи буде циклічно програватися файл (“**Loop Animation**”). Для цього необхідно натиснути кнопку . Буде відкрито вікно:



Встановлюємо відповідні параметри та натискаємо кнопку  та зберігаємо файл.

Анімації можна компанувати і в ручному режимі. Для цього створюють моделі, модифікують їх (обертають, змінюють кути, довжини зв'язків та ін.) та кожний з фреймів (кадрів) додають за допомогою кнопки **Add Frame** (). Зітерти останній фрейм можна за допомогою кнопки **Delete Frame** (). Використання кнопки **New Frame Set** призводить до стирання всіх кадрів.

#### 7.4. Завдання для самоконтролю

1. Створіть 3D моделі метану, етану, пентану, циклогексану, циклобутану. Визначте кути між зв'язками та відстані між атомами. Поясніть результати досліджень.
2. Створіть дві 3D моделі найбільш стійких конформерів бутану. Укажіть, який із них має меншу внутрішню енергію.
3. Створіть 3D моделі етану, етену, етину, бензену. Визначте кути між зв'язками та відстані між атомами. Поясніть результати досліджень.
4. Створіть 3D моделі етанолу, ацетатної кислоти, диетилового етеру. Визначте кути між зв'язками та відстані між атомами. Поясніть результати досліджень.
5. Створіть 3D модель-презентацію стирену в Power Point.
6. Створіть презентацію що відображає механізм взаємодії HBr з бут-1-еном.

## 8. Приклади застосування ChemSketch

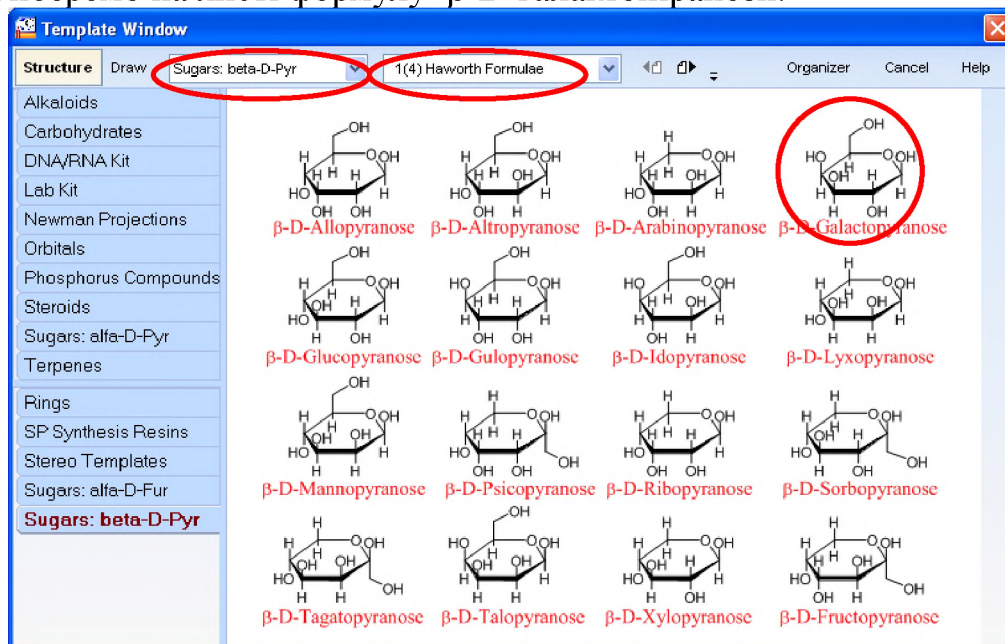
### 8.1. Написання формул ди- та олігосахаридів

Для написання ди- та олігосахаридів зручно використовувати готові шаблони. Відкриємо вікно шаблонів .

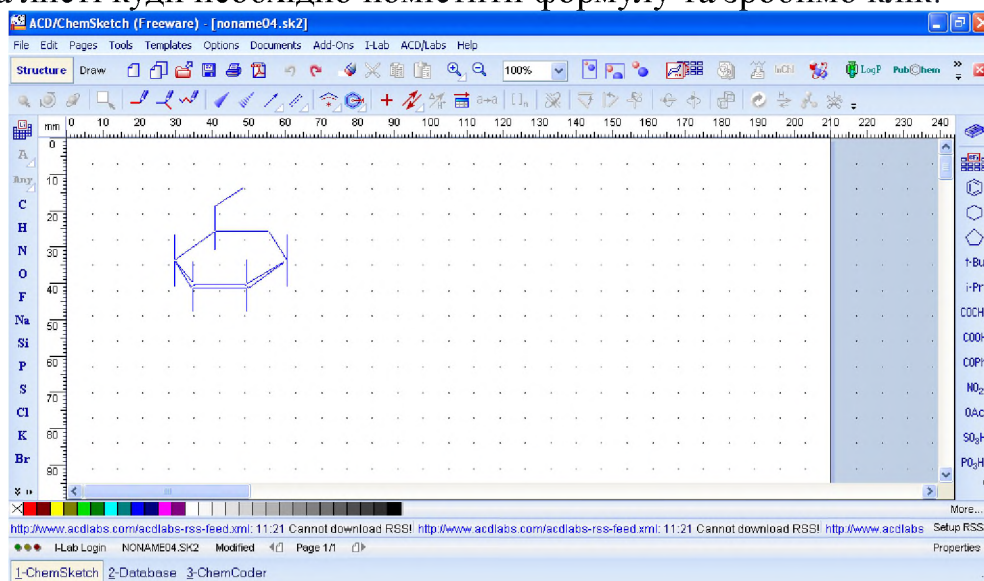
Наприклад, напишемо формулу лактози (4-( $\beta$ -D-галактопіранозил)- $\alpha$ -D-глюкозипіранози).

Виберемо шаблон Sugar, лист №1 beta-D-Pyr Haworth Formulae.

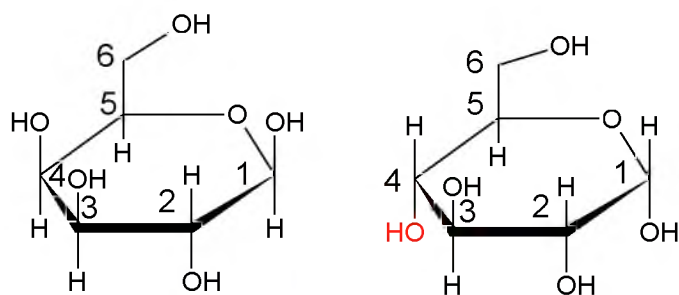
Виберемо на листі формулу  $\beta$ -D-галактопіранози:




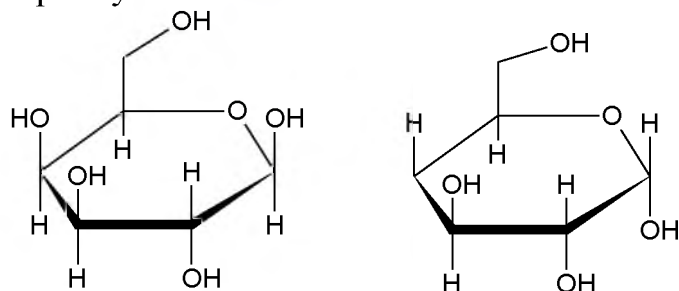
При натисканні правою клавішею миші вікно шаблонів закриється. Виберемо місце на листі куди необхідно помістити формулу та зробимо клік:




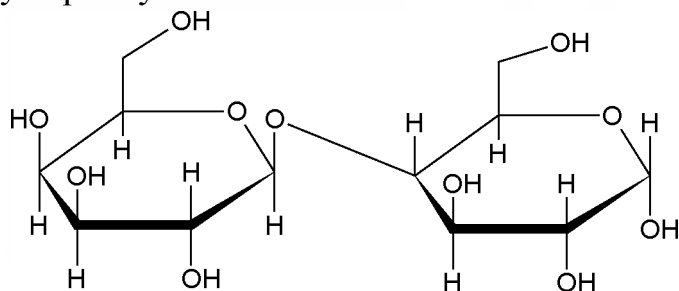
Виберемо шаблон Sugar: alpha-D-Pyr лист №1 Haworth Formulae, та формулу  $\alpha$ -D-глюкопіранози. Помістимо їх в ряд:




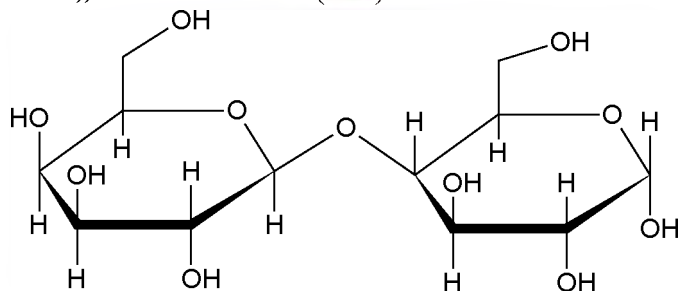
Зітремо OH-групу біля 4-го атома Карбону глюкози. Для цього виберемо інструмент **“Delete”** () і піднесемо маніпулятор “миша” до OH-групи 4-го атома Карбону глюкози:



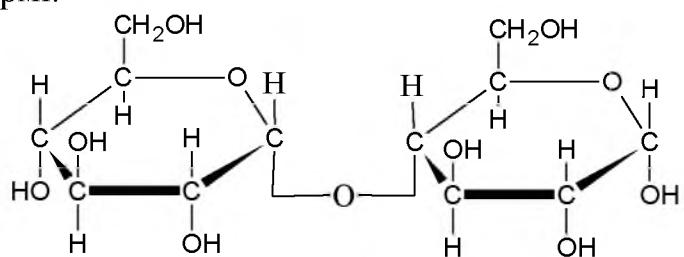
Виберемо інструмент **„Draw Continuous”** () , зробимо клік по гідроксогрупі біля першого атома галактози, а потім по четвертому невидимому атому карбону глюкози:



Виберемо інструмент **„Select/Move”** () та поставимо Оксиген по центру:



Інколи в підручниках зображують формулу мальтози та інших дисахаридів у формі:

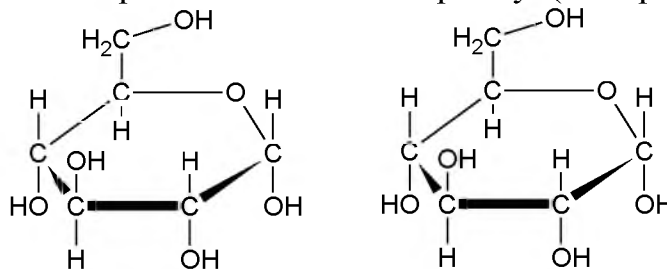


Таке зображення може неоднозначно трактуватися, оскільки перегин зв'язку може розглядатися як атом Карбону. Тому слід уникати подібної

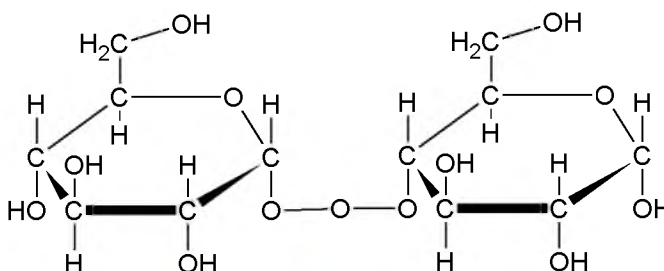


форми запису.

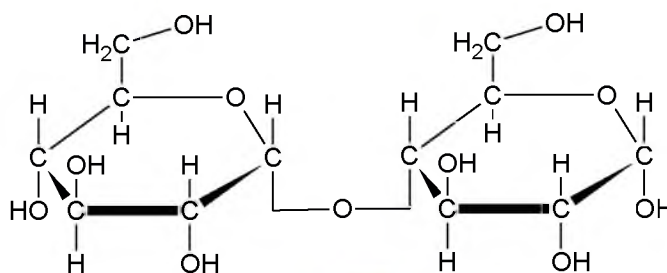
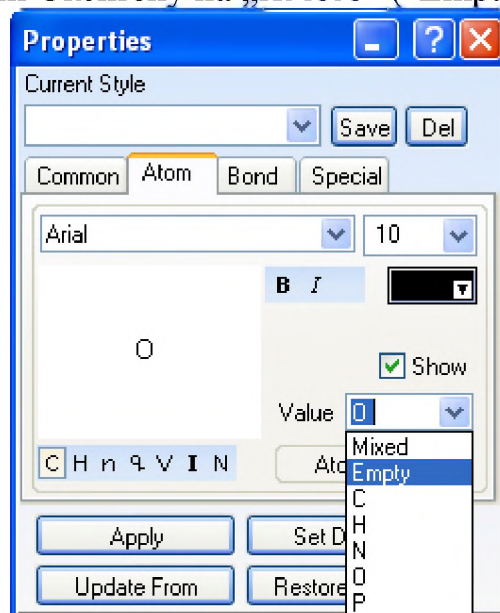
Для того, щоб зобразити таку формулу, напишемо дві молекули  $\alpha$ -D-глюкопіранози, скориставшись шаблонами. Відкриємо панель „Properties” вкладку “Atom” та відобразимо всі атоми Карбону (див. розділ 3.2.2):




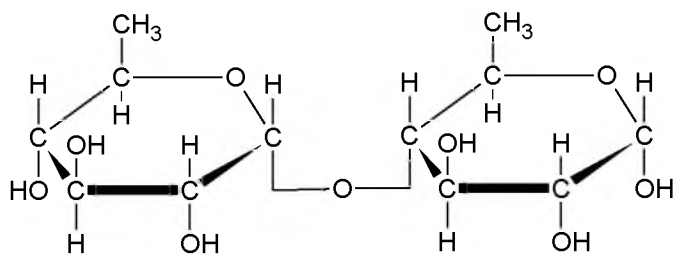
Виберемо інструмент для написання атомів Оксигену на лівій панелі та з'єднаємо молекули:




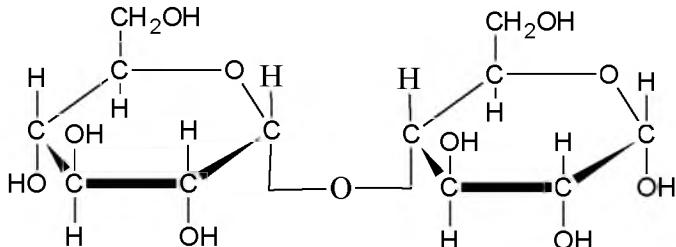
Замінімо зайві атоми Оксигену на „Нічого” (“Empty”):



Виберемо інструмент “Delete” () та зітремо групи –ОН біля 6-го атома Карбону:




Виберемо на лівій панелі інструмент „Edit Atom Label” () та замінімо радикали метил на CH<sub>2</sub>OH:




## 8.2. Написання формул ди- та олігопептидів

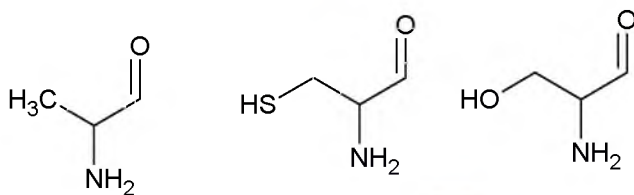
### 8.2.1. Застосування вікна шаблонів для написання формул ди- та олігопептидів


Застосування ChemBasic для написання ди-, оліго- та поліпептидів описано в розділ 6.1. В цьому розділі буде розглянуто один із методів написання ди- та олігопептидів із застосуванням вікна шаблонів („Template Window” - )

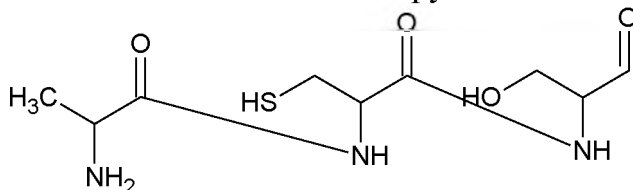
Написання формул ди- та олігопептидів із застосуванням шаблонів проводиться подібно до написання формул ди- та олігосахаридів (розділ 8.1.)


Наприклад, напишемо формулу трипептиду Аланін-Цистеїн-Серин.

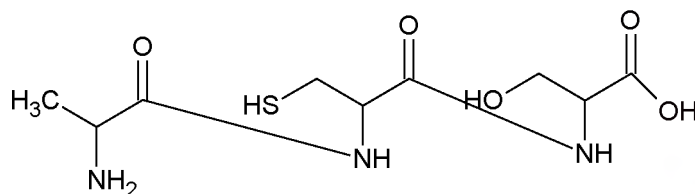
Відкриємо вікно шаблонів () , виберемо шаблон „Amino Acid” , лист №3 „Radicals” та перенесемо із шаблону три радикали на лист (Ala-Cys-Ser):



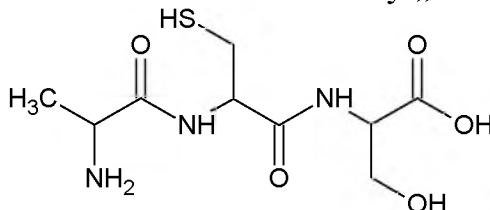
Виберемо інструмент „Draw Normal” () і з’єднаємо перший атом Карбону амінокислоти з відповідною аміногрупою:




Додамо до радикалу Ser групу OH до першого атома Карбону. Для цього виберемо на лівій панелі інструмент „Oxygen” () , натиснемо на перший атом Карбону Серину та проведемо мишею по листу до того місця, де повинна знаходитися гідроксогрупа:



Упорядкуємо атоми натискаючи на кнопку „Clean” (  ):




Подальше упорядкування в ручному режимі можна здійснити, використовуючи інструмент „Select/Move” (  ).

### 8.2.2. Завдання для самоконтролю

- 1) Запишіть формули дипептидів:
  - a) Arg-Asp;
  - b) Trp-Glu.
- 2) Запишіть формули трипептидів:
  - a) Gln-Leu-Asp;
  - b) Ile-Lys-Phe.
- 3) Напишіть формулу інсуліну.

## 8.3. Написання формул вітамінів

### 8.3.1. Застосування вікна шаблонів для написання формул вітамінів

Проводиться подібно до написання ди- та олігосахаридів (розділ 8.1.) із використанням шаблонів „Vitamins” вікна „Template Window” - .


### 8.3.2. Завдання для самоконтролю

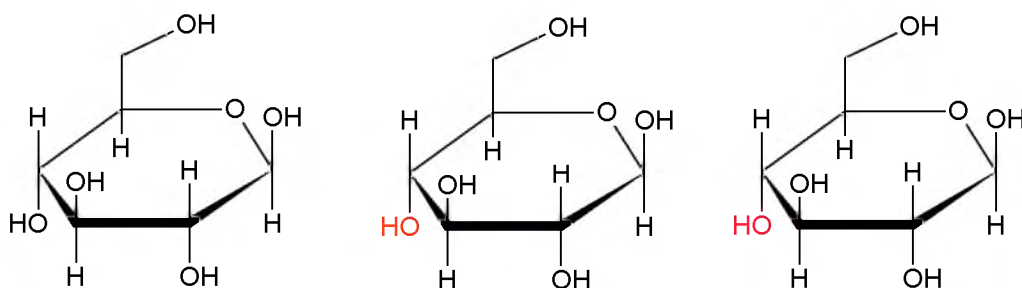
- 1) Запишіть формулу вітаміну А.
- 2) Запишіть формулу каротину.
- 3) Запишіть формулу кобаламіну.


## 8.4. Написання формул полімерів


### 8.4.1. Написання формул полісахаридів

Наприклад, напишемо формулу целюлози.

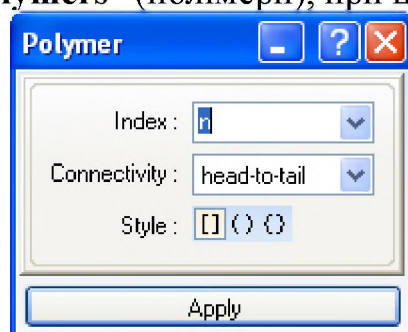
Відкриємо вікно шаблонів , виберемо шаблон Sugar: beta-D-Pyr лист №1 Haworth Formulae на лист три рази скопіюємо формулу  $\beta$ -D-глюкопіранози:




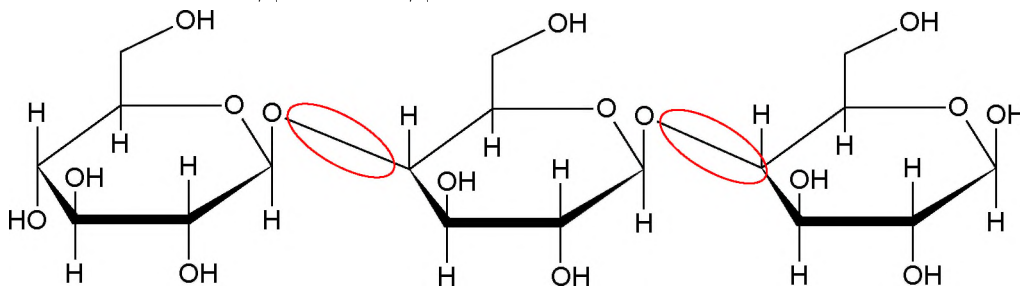
Зітремо OH-групи біля 4-го атома Карбону молекул глюкози. Для цього виберемо інструмент **“Delete”** (  ) і піднесемо до OH-групи 4-го атома Карбону кожної молекули глюкози.

Виберемо інструмент **“Draw Normal”** (  ) і з’єднаємо гідроксогрупи біля першого атома карбону з четвертим атомом Карбону наступної молекули:

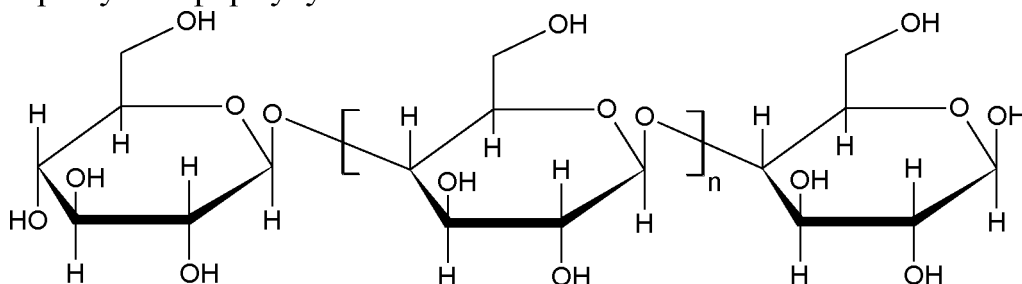
Виберемо інструмент **“Polymers”** (полімери), при цьому відкриється вікно:




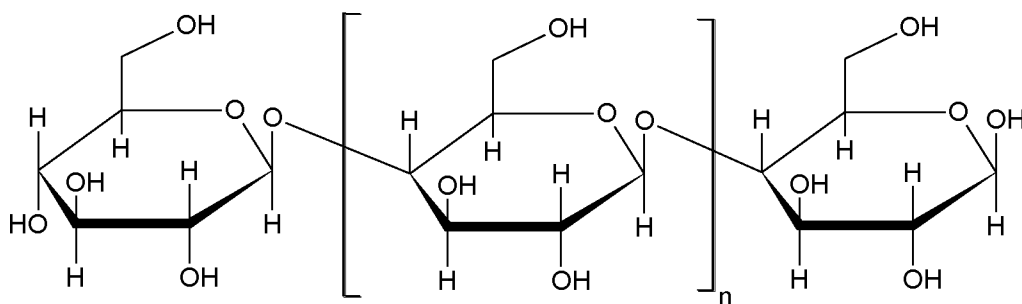
Введемо кількість груп (n або число), налаштуємо спосіб приєднання – **„Connectivity”**: head to tail (голова до хвоста), виберемо дужки (**“Style”**)  , та зробимо клік послідовно по двох зв’язках:



Отримуємо формулу:



Перемикаємо програмний засіб в режим **„Draw”** та за допомогою інструмента  збільшуємо висоту дужок:




### 8.4.2. Завдання для самоконтролю

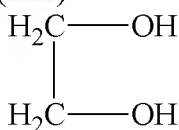
- 1) Запишіть формулу поліетилену.
- 2) Запишіть формулу поліпропілену.
- 3) Запишіть формулу натурального каучуку.
- 4) Запишіть формулу гутаперчі.
- 5) Запишіть формули амілози та амілопектину.


## 8.5. Написання формул координаційних сполук

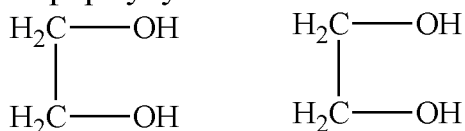
### 8.5.1. Застосування інструменту “Coordinating [Arrow] Bonds” для написання формул сполук з координаційними зв’язками


Наприклад, напишемо формулу Купрум (II) гліколяту.

Запишемо формулу етиленгліколю, використовуючи інструменти верхньої панелі “**Draw Normal**” () та лівої панелі **C** **O**:




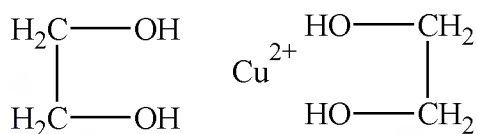
Виберемо інструмент верхньої панелі “**Instant Template**” (тимчасовий шаблон) () та скопіюємо формулу:




За допомогою інструменту верхньої панелі “**Flip Left to Right**” () обернемо другу формулу:

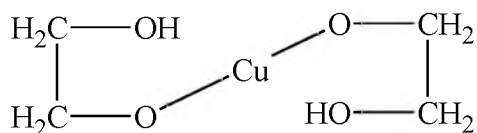



Скористаємося інструментом лівої панелі “**Periodic Table of Elements**” (періодична таблиця елементів) () . Виберемо з таблиці Cu та помістимо по центру між молекулами етиленгліколю:



Виберемо інструмент  та додамо ковалентні зв’язки:

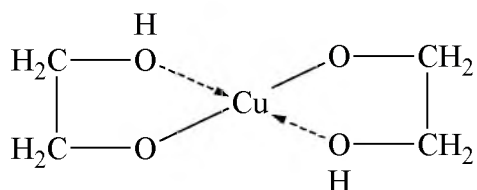




Натиснемо на білий трикутник інструменту верхньої панелі **“Coordinating [Arrow] Bonds”** (координаційні зв’язки) , виберемо із набору інструментів пунктирну стрілку:



Додамо координаційні зв’язки:



Для налаштування вигляду зв’язків використовується панель **„Properties”** вкладка **„Bond”** (розділ 3.2.3)

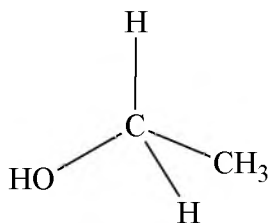
### 8.5.2. Завдання для самоконтролю



- 1) Запишіть формулу купрум (II) гліцерату.
- 2) Запишіть формулу комплексної сполуки глюкози  $\alpha$ -D-глюкопіпанози з Купрум (II) іоном.
- 3) Запишіть формулу комплексної сполуки аланіну з Купрум (II) іоном.
- 4) Запишіть формулу гем-ферропрото-порфірину.

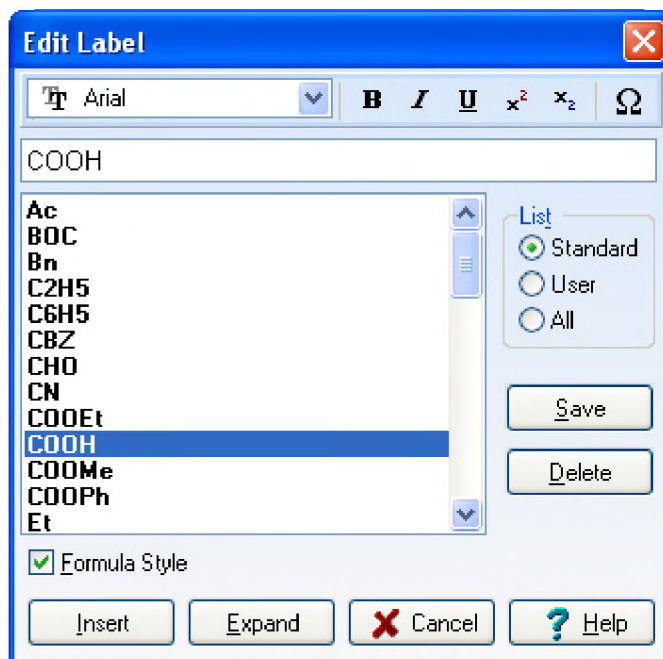
## 8.6. Написання формул стереоізомерів

### 8.6.1. Застосування інструментів **„Up Stereo Bonds”** та **„Down Stereo Bonds”**

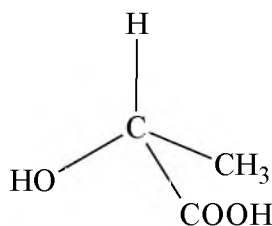
Наприклад, напишемо формули стереоізомерів молочної кислоти. Для цього спочатку запишемо 3D формулу етанолу:





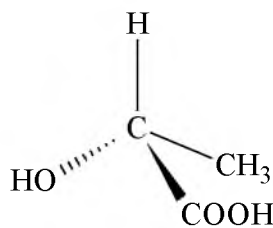
Замінімо нижній атом Гідрогену спирту на групу  $-\text{COOH}$ . На лівій панелі атомів виберемо інструмент **“Edit Atom Label”**  (якщо інструмент не можете знайти, натисніть на кнопку  в нижній частині панелі), зробимо клік по нижньому атому Гідрогену спирту. Відкривається вікно:





В групі "List" виберемо опцію „Standard” та групу “COOH”, натиснемо кнопку „Insert”:

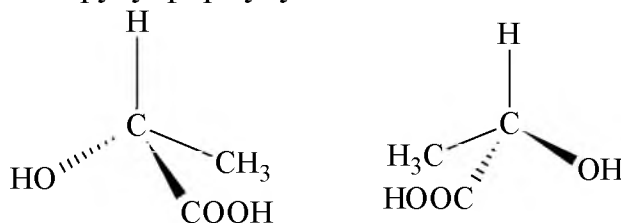


Для зображення наближених/віддалених до переднього краю зв'язків використовуються інструменти верхньої панелі „Up Stereo Bonds” (  ) та „Down Stereo Bonds” (  ). Замінімо зв'язки звичайні зв'язки на стерео:



Для налаштування вигляду зв'язків використовується панель „Properties” вкладка „Bond” (розділ 3.2.3).

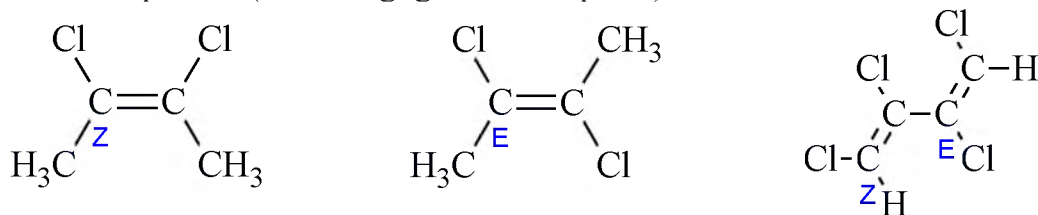
Виберемо інструмент верхньої панелі “Instant Template” (тимчасовий шаблон) (  ), скопіюємо формулу та за допомогою інструмента „Flip Left to Right” (  ) обернемо другу формулу:



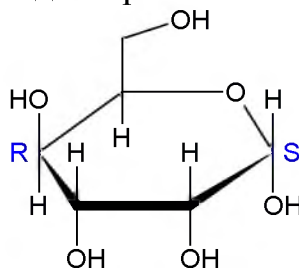
### 8.6.2. Визначення параметрів стереоізомерів

За допомогою команди меню „Tools”>**Generate > Stereo Descriptors command** можна знайти стерео дескриптори для подвійних зв'язків, хіральних та псевдохіральних центрів. Якщо виділено окрему формулу, то параметри стереоізомеру будуть визначені для даної формули, в іншому разі дескриптори будуть знайдені для всіх сполук.

Після виконання команди, замісник біля подвійного зв'язку у цис-положенні буде позначено літерою Z (нім. zusammen – разом), а у транс-положенні літерою E (нім. entgegen – навпроти) :

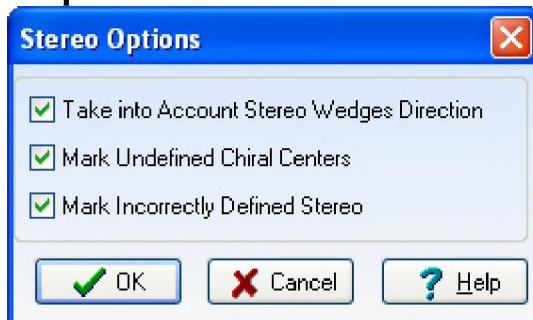


Літерами R (лат. rectus – правий) та S (лат. sinister - лівий) описуються конфігурації хіального центру згідно правилами Кана-Інгольда-Прелога:



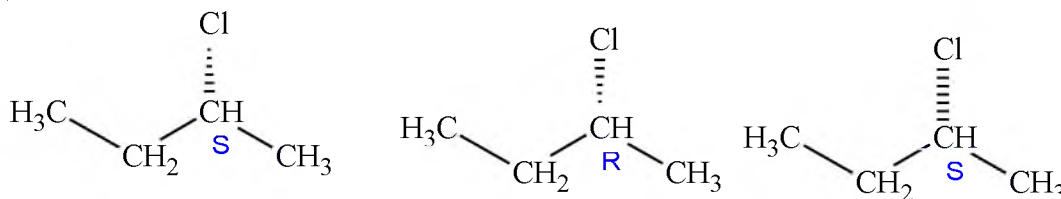
Малі r та s описують конфігурацію псевдохіральних центрів.

Налаштування функції **Stereo Descriptors command** здійснюється за допомогою панелі „Stereo Options”:

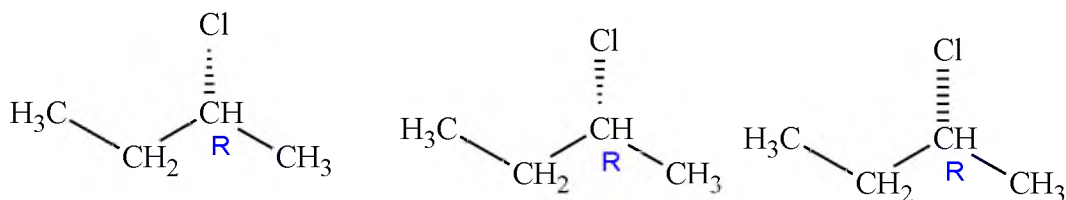


Активізується панель командою **Generate > Stereo Descriptors Options command**.

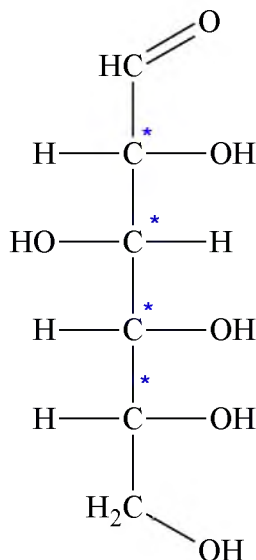
Опція “**Take into Account Stereo Wedges Direction**” вмикає/вимикає аналіз напрямку зв'язку. Результат роботи програмного засобу при увімкненій опції буде такий:



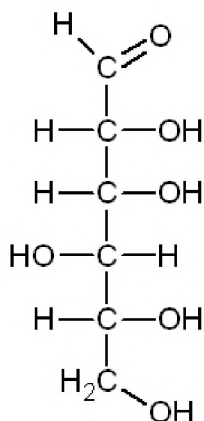
При вимкненій опції:



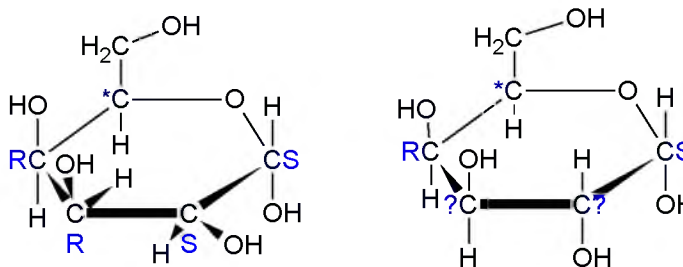
При увімкненій опції “**Mark Undefined Chiral Centers**” будуть позначені асиметричні (невизначені хіральні центри) атоми зірочкою:



При вимкненій опції невизначені хіральні центри не будуть позначені:



При увімкненні опції “**Mark Incorrectly Defined Stereo**” атоми хіральності яких визначити неможливо будуть помічені знаком питання «?»:



### 8.6.3. Завдання для самоконтролю

- 1) Запишіть стереоізомери:
  - a. гліцерилового альдегіду;
  - b. гліцину;
  - c. фенілаланіну;
  - d. глютамінової кислоти;
  - e. глюкози та глюконової кислоти.
- 2) Запишіть енантіомери глюкози.
- 3) Запишіть 4 діастереомери галактози.

### 8.7. Написання формул іонів та радикалів

#### 8.7.1. Застосування інструментів „Increment (+) Charge” та „Decrement (-) Charge” для написання формул іонів

Для створення формул використовуються команди, які наведені у табл. 8.1.

Таблиця. 8.1.

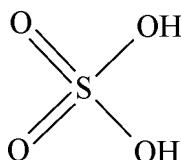
Кнопки для написання іонів та радикалів

Кнопка	Призначення
	Збільшення заряду (Increment (+) Charge)
	Зменшення заряду (Decrement (-) Charge)
	Радикал (Radical)
	Позитивно заряджений радикал (Positive Radical Ion)
	Негативно заряджений радикал (Negative Radical Ion)

Для прикладу запишемо формулу гідросульфат йону.

Використовуючи інструменти верхньої панелі та лівої панелі

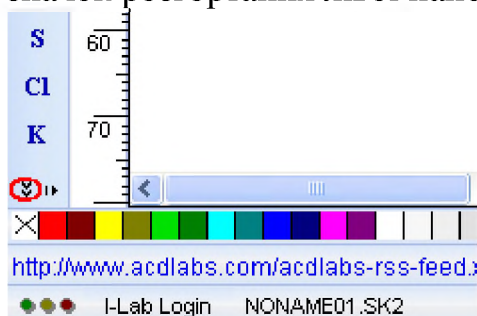
, запишемо формулу сульфатної кислоти:



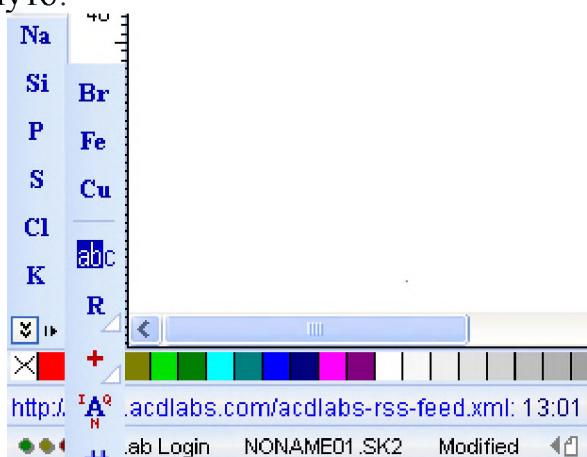
Якщо якась із кнопок, приведених в табл. 8.1., не відображається на лівій




панелі то, натиснемо на значок розгортання лівої панелі :

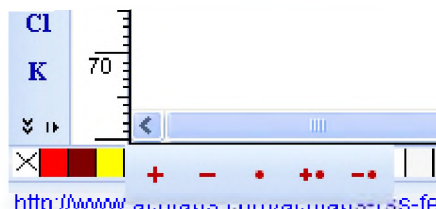



Панель буде розгорнута:

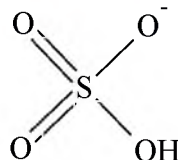


Якщо і при розгортанні панелі кнопка не відображається то необхідно налаштувати панель за допомогою кнопки .

Якщо кнопка присутня, то натискаємо на правий нижній куток кнопки  з'являються кнопки:




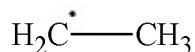
Виберемо , додамо заряд до атома Оксигену:



Спосіб відображення зарядів визначається налаштуванням панелі „Properties” вкладка „Atom” (“Атом”) (див. п.3.2.2)

### 8.7.2. Застосування інструментів „Radical”, “Positive Radical Ion” “Negative Radical Ion” для написання формул радикалів

Наприклад, напишемо формулу етилу. Спочатку запишемо формулу етану. Виберемо інструмент  на лівій панелі та зробимо клік по атому Карбону:



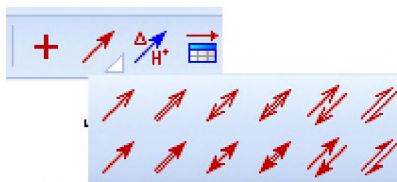
### 8.6.3. Завдання для самоконтролю


- 1) Запишіть формулу гідроортофосфату.
- 2) Запишіть формулу ацетату.
- 3) Запишіть формулу сульфіту.
- 4) Запишіть формулу всіх можливих аніонів пірофосфатної кислоти.
- 5) Запишіть формулу пропілу.
- 6) Запишіть формулу ізобутилу.

## 8.8. Написання рівнянь реакцій

### 8.8.1. Основні інструменти для роботи із рівняннями реакцій


Для роботи з рівняннями реакцій використовуються інструменти верхньої панелі:



 – знак „+” застосовується для розділення вихідних речовин або продуктів реакції;  
 стрілки, застосовуються для розділення вихідних речовин та продуктів реакції:

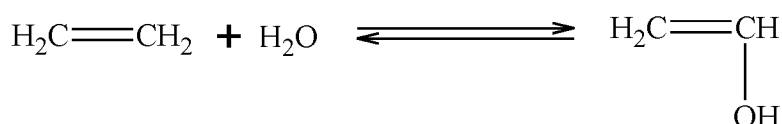



 – застосовується для додавання надписів до стрілок;

 – застосовується для розрахунків за рівнянням реакції.

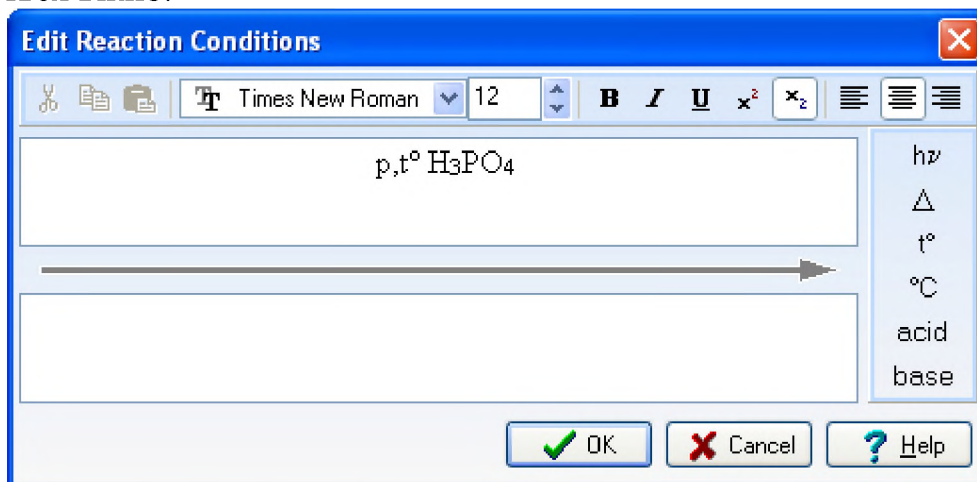
Наведемо приклад використання інструментів. Для зображення рівняння реакції гідратації етилену в присутності ортофосфатної кислоти.

Запишемо рівняння реакції:

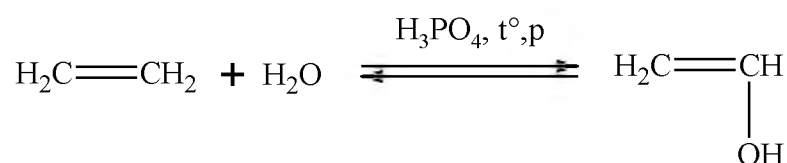


Щоб вказати умови проходження реакції, застосуємо інструмент . Спочатку натиснемо на інструмент, а потім на стрілку в рівнянні реакції.

Відкриється вікно:



Додамо надпис:

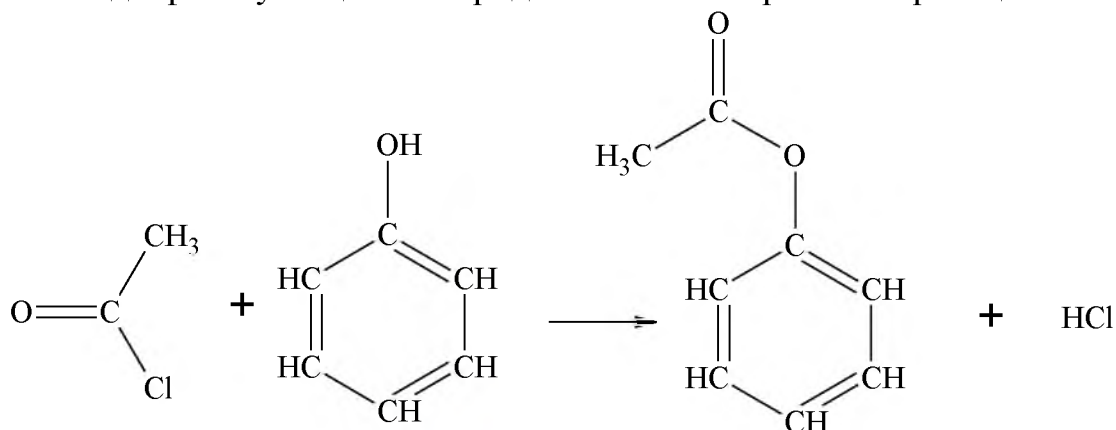



### 8.8.2. Застосування хімічного калькулятора (калькулятора реакцій)

Хімічний калькулятор – ефективний інструмент для розрахунку виходу продуктів, може суттєво прискорити процес розробки та рішення задач.

#### Приклад №1

Наприклад, необхідно розрахувати практичний вихід фенілацетату при взаємодії фенолу з ацетилхлоридом. Запишемо рівняння реакції:



Калькулятор розраховує теоретичний вихід для необоротної реакції. Для цього натиснемо на інструмент , а потім на стрілку в рівнянні реакції.

Відкривається вікно:

Кількість за рівнянням      Концентрація      Об'єм

Молярна маса      Кількість      Маса      Густина

**Reaction Calculator**

Components

Reactant	Formula	FW	K	n	C	m	V	d
1	$C_2H_3ClO$	78.4976	1	-	-	-	-	-
2	$C_6H_6O$	94.1112	1	-	-	-	-	-
Product								
1	$C_8H_8O_2$	136.1479	1	-	-	-	-	-
2	HCl	36.4609	1	-	-	-	-	-
Total	-	-	-	-	-	-	-	-

☒ Show Total

OK Cancel Help

Введемо маси речовин, що прореагували (по 5г ) та продукту реакції (3г) - фенолацетату:

Вихід

**Reaction Calculator**

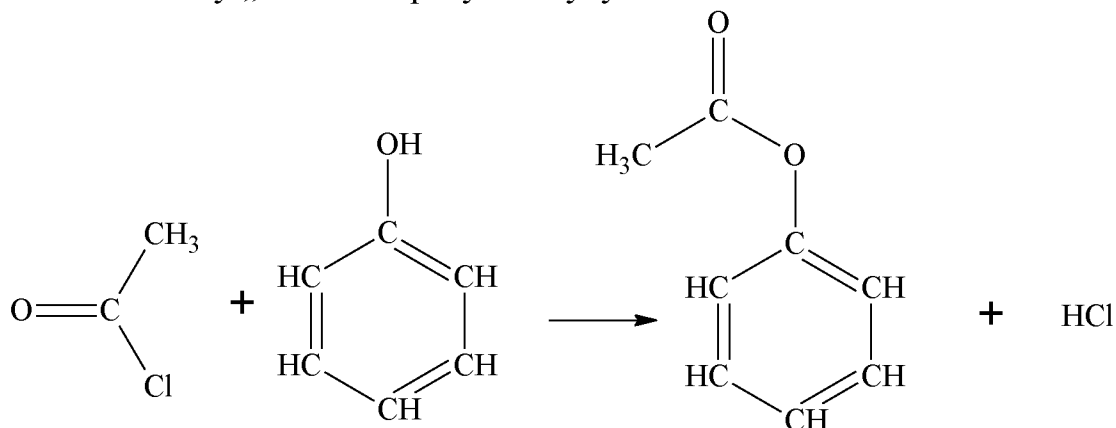
Components

Reactant	Formula	FW	K	n	C	m	V	d	Yield
1	$C_2H_3ClO$	78.4976	1	0.0637	-	5 g	-	-	-
2	$C_6H_6O$	94.1112	1	0.0531	-	5 g	-	-	Based o
Product									
1	$C_8H_8O_2$	136.1479	1	0.022 m	-	3 g	-	-	41.497
2	HCl	36.4609	1	-	-	-	-	-	-
Total	-	-	-	0.1168	-	10 g	-	-	-

☒ Show Total

OK Cancel Help

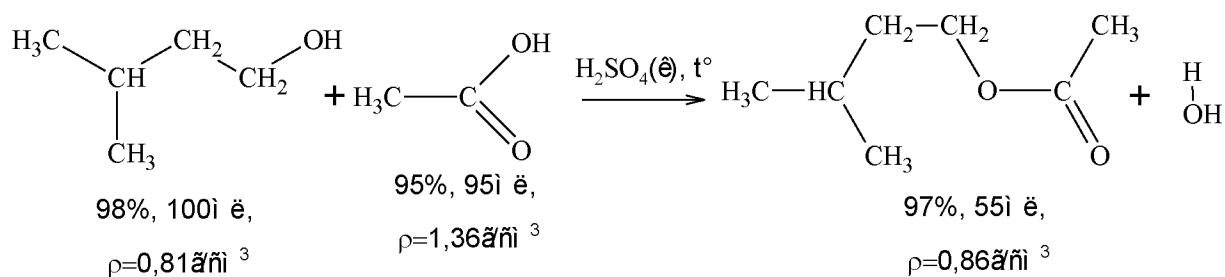
Натиснемо кнопку „ОК”. Розрахунки будуть додані до листа:



Reactant	Formula	FW	K	n	C	m	V	d	Yield
1	C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> ClO	78.4976	1	0.0637 mol	-	5 g	-	-	-
2	C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> O	94.1112	1	0.0531 mol	-	5 g	-	-	Based on
Product									
1	C <sub>8</sub> H <sub>8</sub> O <sub>2</sub>	136.1479	1	0.022 mol	-	3 g	-	-	41.497 %
2	HCl	36.4609	1	-	-	-	-	-	-
Total	-	-	-	0.1168 mol	-	10 g	-	-	-

### Приклад №2

Розрахуємо вихід ізоамілацетату, якщо відомо, що для реакції було взято 100 мл 98% ізоамілового спирту ( $\rho=0,81\text{г/см}^3$ ) та 95 мл 95% ацетатної кислоти ( $\rho=1,36\text{ г/см}^3$ ). У результаті синтезу отримано 55 мл 97% ізоамілацетату ( $\rho=0,86\text{ г/см}^3$ ).



Reactant	Formula	FW	K	n	C	m	V	d	Yield
1	C <sub>5</sub> H <sub>12</sub> O	88.1482	1	0.9005 mol	98 %	81 g	100 mL	0.81 g/mL	Based on
2	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	60.0520	1	2.0439 mol	95 %	129.2 g	95 mL	1.36 g/mL	-
Product									
1	C <sub>7</sub> H <sub>14</sub> O <sub>2</sub>	130.1849	1	0.3524 mol	97 %	47.3 g	55 mL	0.86 g/mL	39.137 %
2	H <sub>2</sub> O	18.0153	1	-	-	-	-	-	-
Total	-	-	-	2.9444 mol	-	210.2 g	195 mL	-	-



### 8.8.3. Завдання для самоконтролю

1. Запишіть рівняння реакції отримання діетилового етеру.
2. Запишіть рівняння реакції синтезу ізопропілпропіонату.



3. Запишіть рівняння реакції Дюма.
4. Запишіть рівняння реакції окислення толуену розчином калій перманганату.
5. Запишіть рівняння реакцій гліколізу.
6. Створіть дві задачі на вихід речовини з використанням хімічного калькулятора.

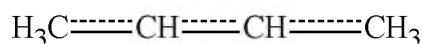
### 8.9. Текстові надписи

Надписи на листі (коментарі, підписи формул та інше) можна зробити в режимі **“Draw”**, використовуючи інструменти **“Text”** та **“Artistic Text”** ( ).

### 8.10. Застосування ChemSketch для відображення механізмів реакцій




#### 8.10.1. Зображення делокалізованого зв'язку в неароматичних сполуках

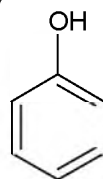
Для зображення ароматичного зв'язку в неароматичних сполуках використовуються інструменти верхньої панелі **„Delocalized Bonds”** (делокалізований зв'язок):






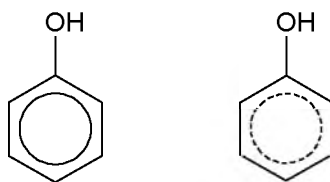
#### 8.10.2. Зображення формул ароматичних сполук

Наприклад, необхідно зобразити молекулу фенолу.

Використаємо інструмент **„Benzene”**  панелі радикалів для зображення ароматичного ядра. Виберемо інструменти верхньої панелі  та лівої панелі  і додамо гідроксогрупу:



Для того, щоб зобразити делокалізований зв'язок у вигляді кільця виділимо фенільний радикал, використовуючи інструмент  та натиснемо на кнопку **“Solid Delocalization Curve”** . Якщо необхідно зобразити делокалізований зв'язок пунктиром, розкриємо кнопку, натиснувши на білий трикутник в лівій нижній частині кнопки та оберемо інструмент **“Dotted Delocalization Curve”** .

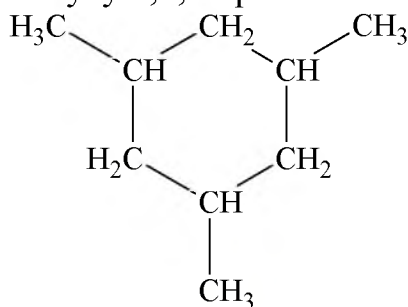


Аналогічно можна зображувати делокалізований зв'язок і не в циклічних сполуках.

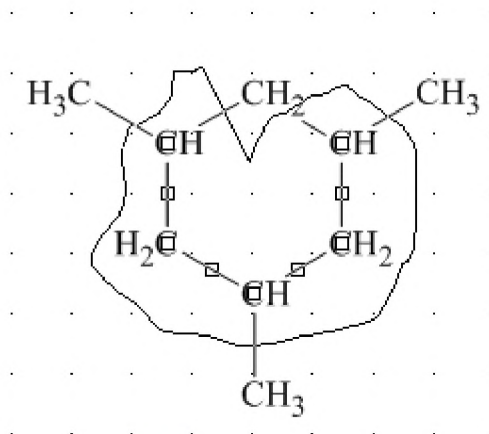
### 8.10.3. Зображення ароматичних іонів з делокалізованим зв'язком

Наприклад, зобразимо проміжну сполуку при бромованні мезителену:  $C_6H_3^+(CH_3)_3Br$ .

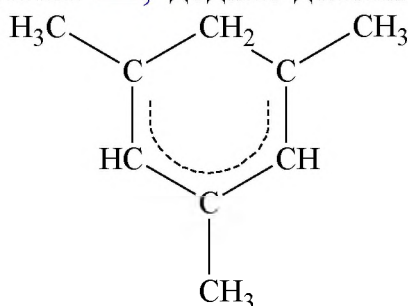
Спочатку, зобразимо молекулу 1,3,5-триметилгексану:



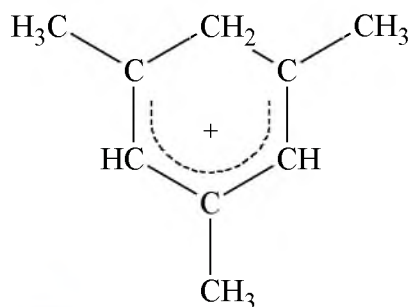
Використовуючи інструменти та , виділимо атоми та зв'язки (на початку виділення курсор необхідно помістити в центр молекули, бокові радикали не виділяти):



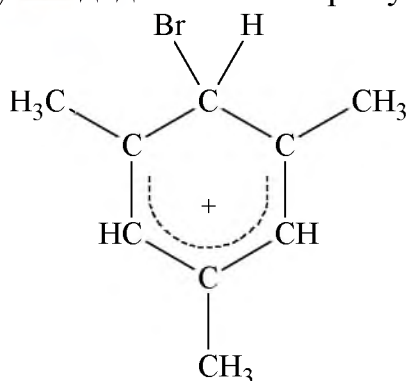
Використовуючи інструмент , додамо делокалізований зв'язок ” .



До одержаної формули додамо заряд використаємо інструмент “Increment (+)Charge” :



За допомогою інструменту  додамо атоми Брому та Гідрогену:

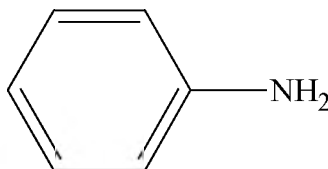


#### 8.10.4. Зображення індуктивного та мезомерного ефектів у формулах речовин


Для зображення індукційних та мезомерних ефектів можна використати інструменти малювання.

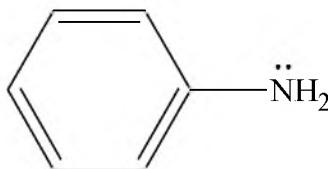
Наприклад відобразимо індуктивні та мезомерні ефекти в формулі молекули аніліну.




Спочатку зобразимо формулу молекулу аніліну:

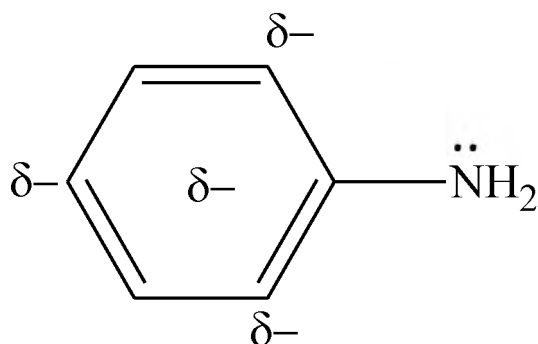



Перейдемо в режим „Draw”.

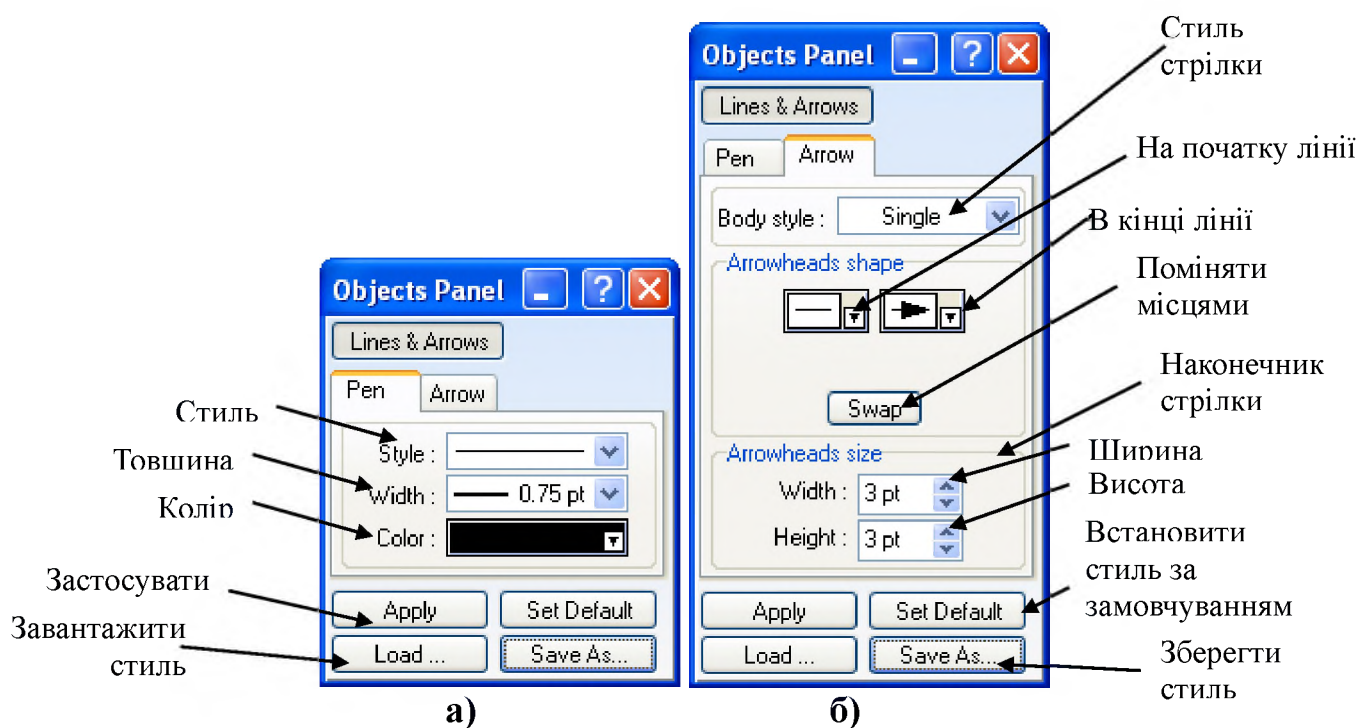
Використовуючи інструмент,  + Ctrl, додамо неподільну електронну пару до Нітрогену аміногрупи.




Групуємо точки за допомогою інструмента  Скористаємося інструментом „Text” , щоб дописати розподілення зарядів в молекулі. Увімкнемо шрифт „Symbol” () та уведемо “d”- отримаємо грецьку букву “δ”, допишемо „-”, скопіюємо три рази та розставимо заряди.

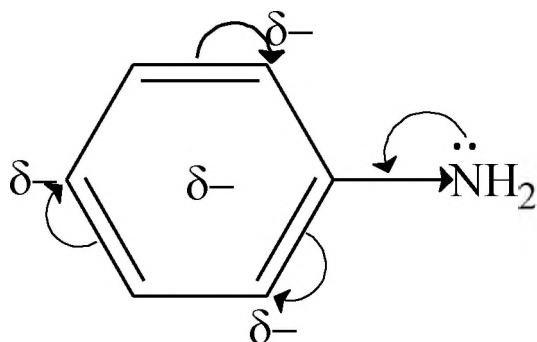


Домалюємо стрілки. Для цього скористаємося інструментом дуга - . Після написання дуги зробимо подвійний клік по об'єкту та налаштуємо його параметри. Панель налаштування дуги має дві вкладки (рис. 8.10.1.a, b) **“Pen”** – перо, та **“Arrow”** – стрілка. У першій вкладці налаштовується товщина лінії, стиль та колір, у другій налаштовується вигляд наконечника стрілки.



**Рис. 8.10.1** Панель налаштування об'єкта „Arc 180°”  
а) вкладка перо; б) вкладка стрілки

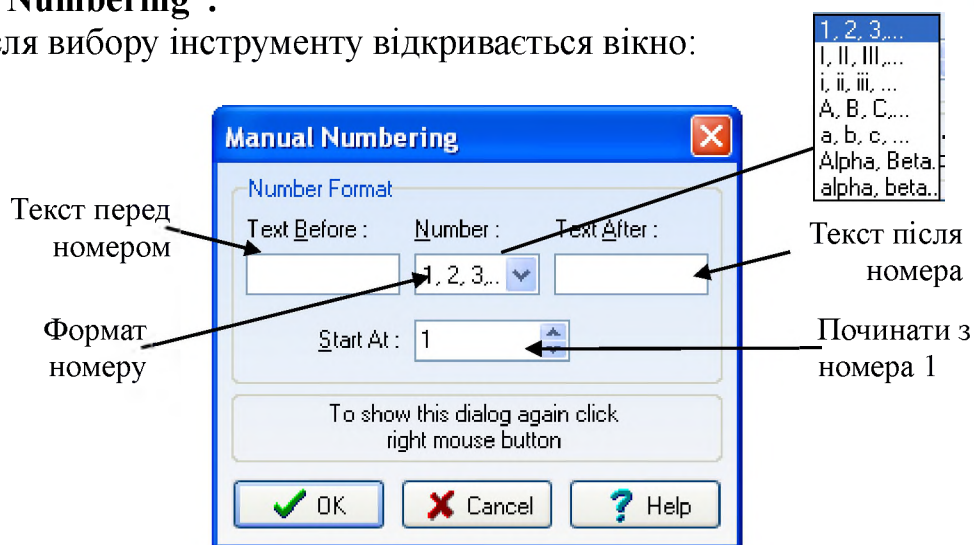
Використовуючи інструмент , додамо поперх зв'язку стрілку від Карбону до аміногрупи:



### 8.10.5. Ручна нумерація атомів

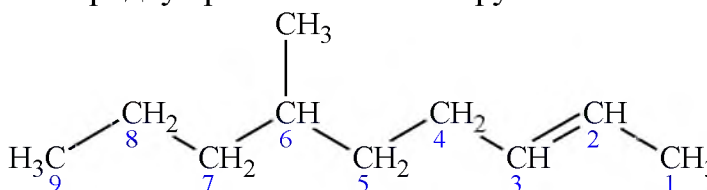
Для ручної нумерації використовується інструмент лівої панелі - „Manual Numbering”.

Після вибору інструменту відкривається вікно:



У цьому вікні встановлюється текст, що буде написаний перед номером атома, після номера атома, початковий номер атома та формат номеру.

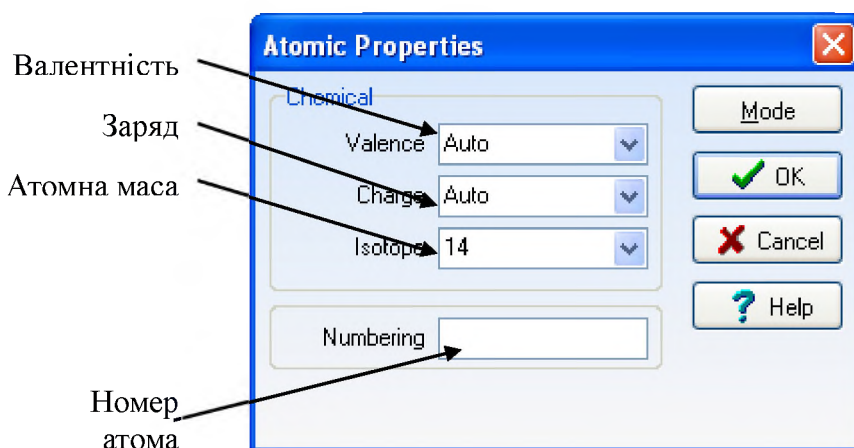
Для нумерації після натиснення кнопки „OK” необхідно робити клік по кожному з атомів в порядку зростання їх номеру:



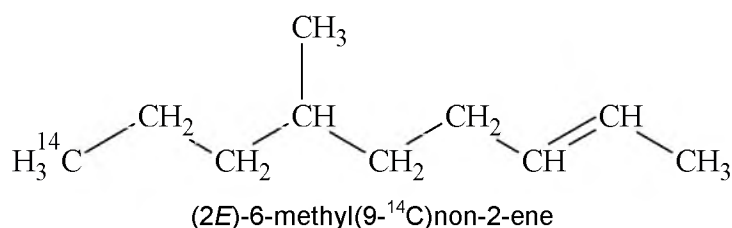
Нумерацію можна прибрати, виконавши команду меню **Tools > Clear Numbering**.

### 8.10.6. Відображення ізотопного складу та валентності атома

Для відображення ізотопного складу використовується інструмент лівої панелі „Atom chemical properties” (властивості атома) . Після вибору інструмента необхідно зробити клік по відповідному атому. З'являється панель, де можна виставити валентність атома, заряд, атомну масу та номер:



Позначимо атомну масу 9-атома Карбону, та згенеруємо назву:



### 8.10.7. Карта реакції

Для пояснення переміщення атомів під час хімічної реакції використовують інструменти наведені в табл 8.1:

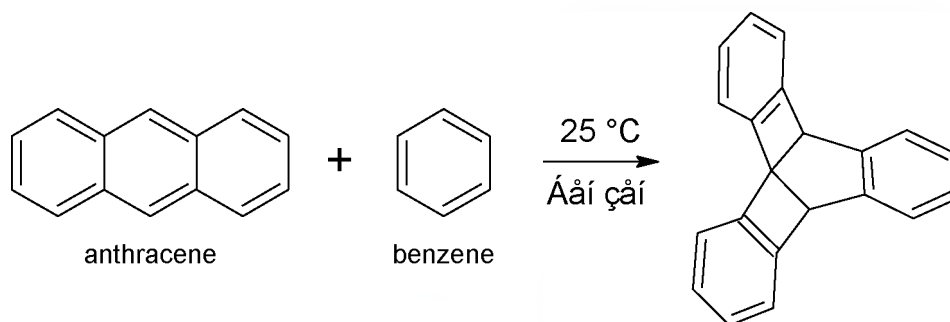
Таблиця. 8.1.

Інструменти для створення карти реакції

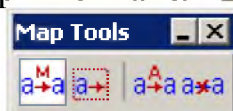
Кнопка	Назва інструменту	Призначення
	Manual Mapping	Ручне створення карти реакції.
	Select Reaction	Виділення реакції. Використовується переважно перед автоматичною нумерацією та видаленням карти реакції.
	Auto Mapping	Автоматичне створення карти реакції. Якщо на листі записано декілька реакцій перед автоматичним створення карти реакції необхідно виділити реакцію ().
	Delete Mapping	Видалення карти реакції.

Наприклад покажемо переміщення атомів при взаємодії бензену з антраценом:

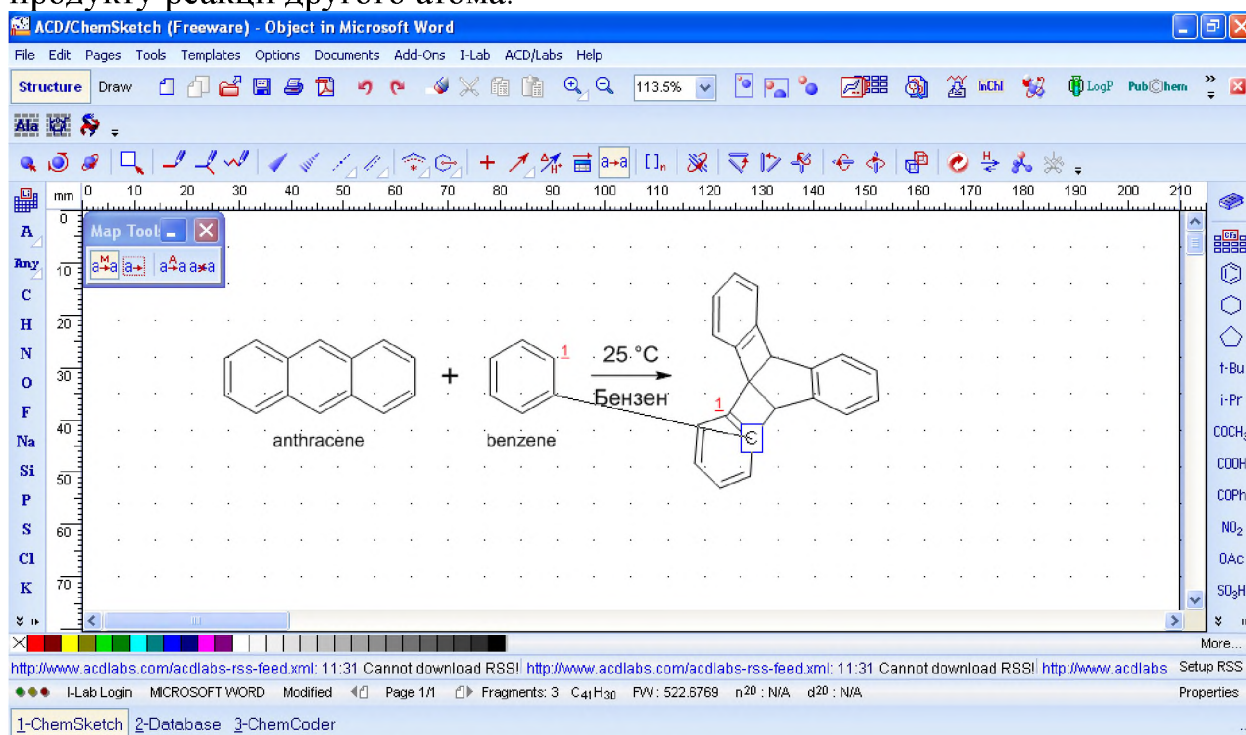




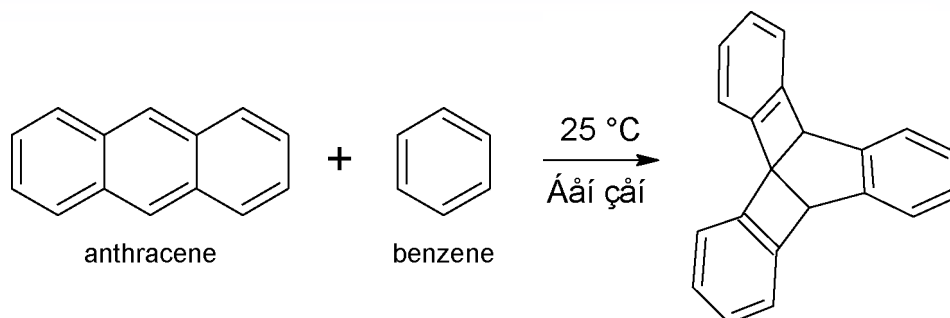
Виберемо інструмент другої верхньої панелі . Відкривається панель:



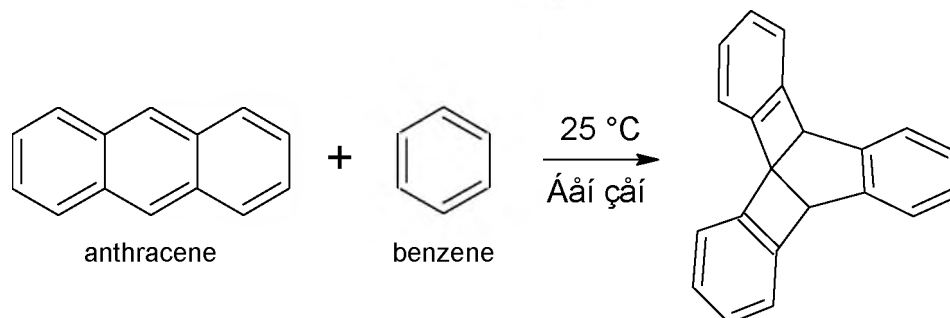
Виберемо інструмент для ручного створення карти реакції, для цього натиснемо на перший атом Карбону і проведемо лінію до цього ж атому в продукті реакції. Укажемо переміщення таким же чином із бензину до продукту реакції другого атома:





Отримуємо карту переміщення двох атомів:



Натиснемо на кнопку „Auto Mapping” , отримаємо:

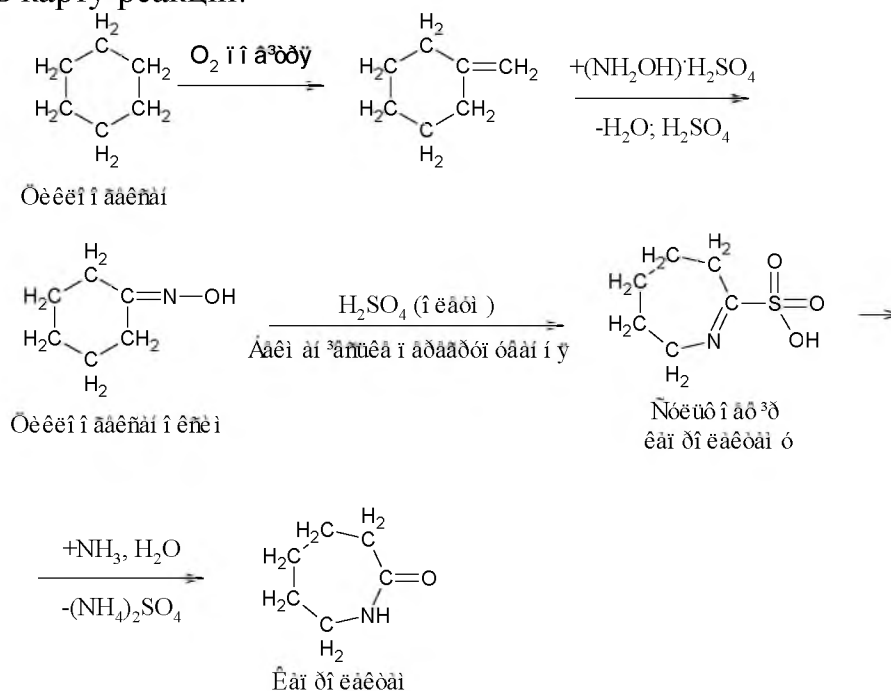


Якщо на листі записано декілька реакцій, то перед автоматичним створенням карти необхідно виділити рівняння окремих реакцій.

Щоб скопіювати реакцію разом з картою, використовуємо інструмент  – для виділення реакції, а для її копіювання – .

### 8.10.8. Завдання для самоконтролю

1. Вкажіть індуктивні та мезомерні ефекти в молекулі фенолу.
2. Вкажіть індуктивні та мезомерні ефекти в молекулі акрилонітрилу.
3. Вкажіть індуктивні та мезомерні ефекти в молекулі 1-хлорбут-1,3-дієну.
4. Вкажіть індуктивні та мезомерні ефекти в молекулі бензальдегіду.
5. Вкажіть індуктивні та мезомерні ефекти в катіоні діазонію.
6. Створіть карту реакції утворення ізоамілацетату з урахуванням того, що перший атом Карбону ацетатної кислоти є ізотопом з  $A_r=14$ .
7. Створіть карту реакції взаємодії бут-2-єну з гідрогенхлоридом.
8. Створіть карту реакції взаємодії етину з бенzenом.
9. За допомогою карти реакції відобразіть механізм реакції Кучєрова.
10. Відобразіть механізм алкілування бензену етиленом.
11. Створіть карту реакцій:



## **Література**

1. ACD/ChemSketch. Version 12.0 for Microsoft Windows. Tutorial Drawing Chemical Structures and Graphical Images. Copyright © 1997–2008 Advanced Chemistry Development, Inc.
2. ChemSketch: Guide to Drawing Chemical Structures Scott A. Sinex and Barbara A. Gage Department of Physical Sciences Prince George's Community College. <http://academic.pgcc.edu/psc>. January 2004.

## Предметний вказівник

*	Border.....	39, 63
*.skc.....		11
3		
3D Optimization.....		41
3D Rotation .....		41
4		
4-( $\beta$ -D-галактопіранозил)- D- глюкоза .....		65
A		
ACD/3D Viewer		
Встановлення на лаштувань за замовчуванням .....		60
Збереження налаштувань.....		59
Налаштування .....		58
Програмний засіб .....		6, 57
ACD/ChemBasic .....		6
ACD/ChemSketch.....		6
Add Frame.....		64
Add Hydrogen.....		41
Added Or Removed Fragment With Shadow .....		35, 42
Angle .....		62
Animated GIF images .....		63
Animation Interval .....		63
Arrow.....		43, 86
Atom.....		25
Auto Add Frames .....		62
Auto Mapping .....		88, 91
Auto Select Bond .....		42
AUTOSAVE .....		24
B		
Benzene .....		83
Between.....		31
Bond .....		30
Bond Angle.....		40
Bond intersection.....		41
Bond Length.....		40, 60
C		
C (атом Карбону).....		12, 26
Calculate .....		17
Character .....		43
Charge .....		27
ChemBasic		
Carbohydrate Builder.....		51
Nucleic Acid Builder .....		51
Organizer.....		51
Peptide Builder.....		51
Tutorial.....		51
ДНК .....		55
Мова.....		51
Налаштування.....		51
Панель .....		51
Поліпептиди .....		52
РНК.....		55
Clean .....		44, 69
Clean Structure.....		18
Clean Up Structure.....		54
Coordinating .....		33
Coordinating [Arrow] Bonds....		71, 72
Coordinating [Dashed] Bond.....		55
Cross Out Invalid Atom .....		23
D		
Decrement (-) Charge .....		76
Delete .....		66, 67, 70
Delete Frame.....		64
Delete Mapping.....		88
Delocalized Bonds .....		83
Dotted Delocalization Curve ....		83, 84
Down Stereo.....		32
Down Stereo Bonds .....		72
Draw.....		12, 85
Draw Continuous .....		19, 66
Draw Normal .....		12, 19, 68, 70, 71
Draw toolbar .....		16
E		
Edit Atom Label.....		73

Editing toolbar.....	16
Empty .....	67
Enter Code With a Form.....	54

## F

File Associations .....	11
Fixed.....	40, 41
Fixed Angle Rotation .....	63
Flip Left to Right.....	71, 73

## G

General toolbar.....	14
Generate Name for Structure.....	17
Grid.....	39

## H

H (Гідроген).....	41
Hide Zero Charge .....	23

## I

I (ізотоп).....	28
Increment (+) Charge .....	76
Increment (+)Charge .....	85
Informative Cursor Pointer .....	39
Instant Template .....	71, 73
Interval.....	44
ISIS/Sketch.....	11

## K

Keep Draw Toll Active.....	39
----------------------------	----

## L

Length.....	44
Loop Animation.....	63

## M

Manual Mapping .....	88
Manual Mapping Color .....	44
Manual Numbering .....	87
Markush Bond With Shadow ....	35, 42
Markush Shadow.....	42

## N

n (індекс).....	27
-----------------	----

	88
N (нумерація атомів).....	30
Negative Radical Ion.....	76
New Frame Set.....	64
Nucleic Acid Builder.....	55
Numbering .....	30

## P

Page	
Insert .....	49
Margins .....	39
Rename .....	49
Palette.....	38
Pen.....	86
Peptide Builder.....	52
Peptide Builder:Input Option.....	54
Periodic Table of Elements .....	71
Polymers .....	70
Pos.....	31
Positive Radical Ion.....	76
Primary.....	42
Printable Area.....	39
Properties .....	17
Proportional Resize.....	42

## Q

q (заряд).....	27
----------------	----

## R

Radical .....	76
Reaction Calculator.....	80
RSS.....	39
Ruler.....	38

## S

Save user-defined style .....	36
Scale .....	63
Secondary.....	42
Select Graphic.....	42
Select Reaction.....	88
Select/Move .....	19, 66, 69
Select/Move/Resize.....	39
Shift.....	31
Single chain.....	55
SINGLE letter codes.....	53
Solid Delocalization Curve.....	83



Step.....	33
Structure .....	12, 48
Structure toolbar .....	15
Style.....	43
Switch to 3D-Rotation Mode .....	41
Symbol.....	85

## T

Template Window.....	46
Tertiary .....	42
Text.....	85
The whole structure .....	55
Triple .....	32

## U

Up Stereo .....	32, 33
Up Stereo Bonds.....	72
Update From.....	25, 26
Use existing textbox on page .....	53
User Template Window Organizer ..	48

## V

V (валентність).....	28
Valence .....	28
View.....	38

## W

White Space.....	41
Width .....	33, 44
Wireframe 3D Rotation .....	42

## A

Амінокислоти	
Дволітерні символи .....	52
Однолітерні символи.....	52
Ароматичні сполуки.....	83, 84
Атом	
Стиль.....	25
Стиль С (Карбон).....	26

## Б

Бензен .....	83
--------------	----

## B

Валентність	
Відображення .....	87
Виділення	
Друге.....	42
Перше .....	42
Третє .....	42
Визначення	
довжини зв'язку .....	60
кутів .....	62
Вихід речовини.....	80
Вікно	
Вибору папки кнопки „Пуск” ....	8
Вибору програмних засобів .....	7
Інсталяції додаткових	
компонентів .....	8
Ліцензійних домовленостей.....	7
Шаблонів.....	46
Вкладка	
Atom .....	25
Bond.....	30
Clean .....	38, 44
Common.....	22
General .....	38
Reaction .....	38, 43
Special .....	35
Structure .....	38, 40
Властивості молекули/речовини .	17

## Г

Гідроген.....	42
Гідросульфат аніон .....	76
Групування.....	85

## Д

Делокалізований зв'язок .....	83, 84
Дипептиди.....	68
ДНК .....	55

## Е

Етиленгліколь .....	71
---------------------	----

## З

Заряд.....	23, 27
------------	--------

Зв'язок .....	23
Довжина.....	40
Координаційний.....	33
Кут.....	40
Одинарний.....	31
Подвійний.....	31
Потрійний.....	32
Сtereo .....	32
Стиль.....	30

## I

Ізотоп .....	28
Ізотопи .....	87
Індекс .....	27
Індуктивний ефект .....	85
Інсталяція .....	6
Інтерфейс.....	13
Іони .....	76, 84

## K

Калькулятор реакцій .....	80
Карта реакції .....	88
Комплементарний ланцюг .....	55
Координаційні сполуки.....	71
Купрум II гліцерат .....	34

## L

Лактатна кислота .....	72
Лінійка	
Guides.....	39
Відображення.....	38
Лінія	
Налаштування .....	86

## M

Малювання.....	85
Мезомерний ефект.....	85
Модель	
Кулестержнева .....	58
Стюарта-Бриглеба .....	58
Молочна кислота .....	72

## H

Назва речовини .....	17
Нумерація атомів	

Автоматична .....	88, 91
Видалення.....	87, 88
Налаштування.....	30
Ручна .....	87, 88

## O

Обертання .....	60, 73
Олігопептиди.....	68
Олігосахариди .....	65
Оптимізація	
2D.....	44, 54, 69
3D.....	41, 53, 58, 60
Органайзер.....	48

## P

Палітра .....	38
Панель	
Preferences.....	38
Properties .....	22
Панель інструментів	
Головна.....	14
Кнопка налаштування.....	18
Кнопка розгортання .....	18, 77
Малювання .....	16
Радикали.....	19
Редагування .....	16
Хімічні структури .....	15
Полімери .....	69
Поліпептиди .....	52, 68
Помилка у формулі	
Відображення .....	23
ДНК .....	55
РНК.....	55

## R

Радикали.....	78
Рівняння реакції	
+ (плюс).....	43
Написання.....	78
Стиль стрілки .....	43
РНК.....	55

## C

Сітка .....	39
Horizontal Step .....	39

Horizontally Hexagonal .....	39
Option.....	39
Rectangular.....	39
Snap On Grid.....	39
Vertical Hexagonal .....	39
Vertical Step .....	39
Visible.....	39
Прив'язування елементів.....	39
Стереоеізмери .....	72
Стили	
Влаштовані стилі .....	21
Карбон .....	26
Користувача.....	36
Отримання із тексту .....	25, 26
Стили за замовчуванням .....	22
Сторінка	
Відображення полів.....	39
Назва .....	49
Нова .....	49
Стрілка	
Налаштування .....	86

## Т

Таблиця Менделєєва .....	18, 71
--------------------------	--------

## Ф

Файл інсталяції.....	6
----------------------	---

## Х

Хімічний калькулятор.....	80
---------------------------	----

## Ц

Целюлоза.....	69
---------------	----

## Ш

### Шаблони

Amino Acid.....	68
Sugar .....	65, 70
Vitamins .....	69
Вікно.....	46
Копіювання .....	48
Створення .....	49
Шрифт .....	23

## Я

Ярлики.....	10
-------------	----

**Навчальне видання  
Міністерство освіти і науки України  
Харківський національний педагогічний університет  
імені Г.С.Сковороди**

**Автори:  
Винник О.Ф., Свєчнікова О.М., Грановська Т.Я.**

**Застосування програмного засобу  
ACD/ChemSketch (Freeware) 12.0  
для написання хімічних формул та моделювання  
хімічних процесів**

**Навчальний посібник**

**Відповідальний за випуск: Свєчнікова О.М.**

**Комп'ютерна верстка: Винник О.Ф.**

**Коректор: Сидоренко О.В.**

Підписано до друку:

**Міністерство освіти і науки України  
Харківський національний педагогічний університет  
імені Г.С.Сковороди**

До друку та в світ  
дозволяю:

директор інституту інформатизації  
освіти професор А.І.Прокопенко

**Винник О.Ф., Свєчнікова О.М., Грановська Т.Я.**

**Застосування програмного засобу  
ACD/ChemSketch (Freeware) 12.0  
для написання хімічних формул та моделювання  
хімічних процесів**

**Навчальний посібник**

Затверджено редакційно-  
видавничою радою Харківського  
національного педагогічного  
університету імені Г.С.Сковороди  
протокол №      від

**Харків  
2018**