



*Российский государственный университет
нефти и газа им. И.М. Губкина*

Кафедра Информатики

Дисциплина: Информатика

Преподаватель:

К.Т.Н., ДОЦЕНТ

Коротаев

Александр Фёдорович

Программный комплекс ChemOffice



Один из её создателей **квантовой химии** Нобелевский лауреат Р. Малликен:
«Наступит такая эра, когда химики сотнями, если не тысячами, пойдут не в лаборатории, а к вычислительным машинам».

Появилась область науки под названием **компьютерная химия**, в которой компьютер стал таким же реальным инструментом исследования, как и физический или химический эксперимент.

Универсальный химический пакет программных средств **ChemOffice** фирмы **CambridgeSoft Corporation** является на сегодняшний день одним из наиболее популярных в своей области.

Пакет предназначен для :

- ✓ визуализации пространственной структуры химических соединений,
- ✓ прогнозирования их физико-химических свойств,
- ✓ создания и управления базами данных химических соединений,
- ✓ проведения расчетов методами квантовой химии и молекулярной механики.

Состав программного комплекса ChemOffice



Интегрированный программный комплекс **ChemOffice** включает в себя 4 специализированных приложения:

- химический редактор **ChemDraw**, являющийся традиционным средством редактирования химических формул;
- специализированный редактор баз данных **ChemFinder**, предназначенный для создания, редактирования и управления базами данных химических соединений;
- программа **Chem3D**, предназначенная для визуализации химических соединений, компьютерного моделирования и расчетов;
- редактор таблиц **Table Editor**, предназначенный для просмотра и редактирования табличных данных, используемых в пакете Chem3D.

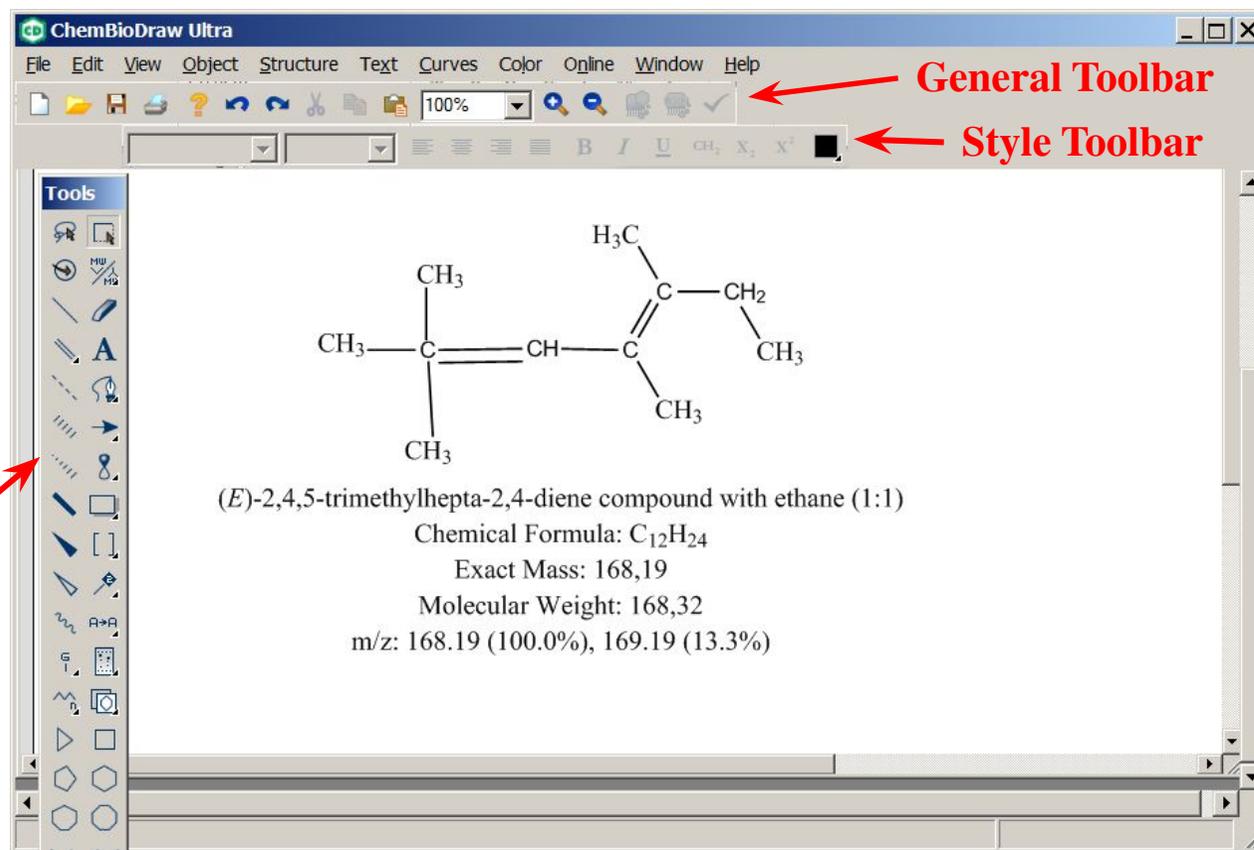
Программа ChemBioDraw Ultra



Программа ChemBioDraw предназначена для двумерного изображения молекулярных структур. Она позволяет отображать на плоскости молекулярные структуры любой сложности, записывать уравнения реакции, присваивать наименования построенным моделям и т.д.

Рабочее окно
программы
ChemBioDraw
Ultra 12.0

Main Toolbar



General Toolbar



-  **Check Structure** – проверить выделенную структуру
-  **CleanUp Structure** – упорядочить структуру

Style Toolbar



Color

-  **Formula** – облегчает ввод химических формул

Установить или убрать любую панель можно в меню **View**

Main Toolbar



The image shows a vertical toolbar titled "Tools" with various drawing tools. Red arrows point from text labels to specific tools in the toolbar. A red oval highlights a group of tools including the Eraser, Text, Arrow, and Bonds tools. Another red oval highlights a group of auto-figures at the bottom of the toolbar.

Выделение прямоугольной или произвольной области

Eraser (Ластик) – удаляет ненужное

Text – для ввода текста

Arrow – рисование стрелок

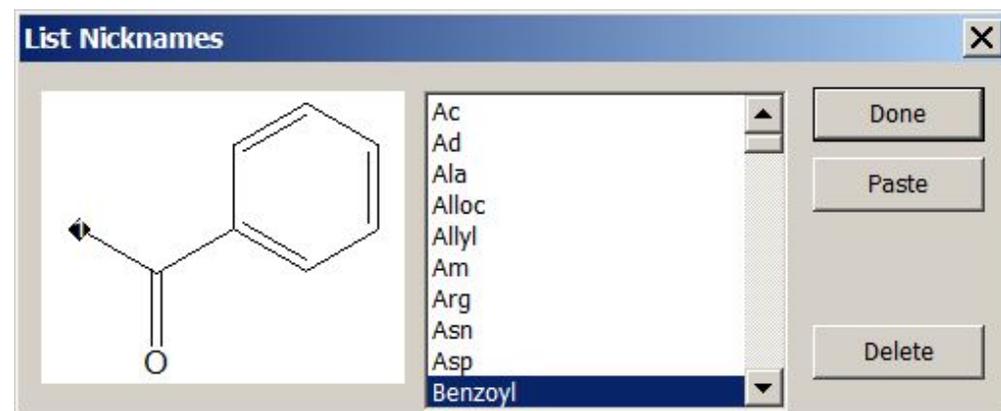
Bonds – рисование связей различного типа

Автофигуры для изображения циклических углеводородов

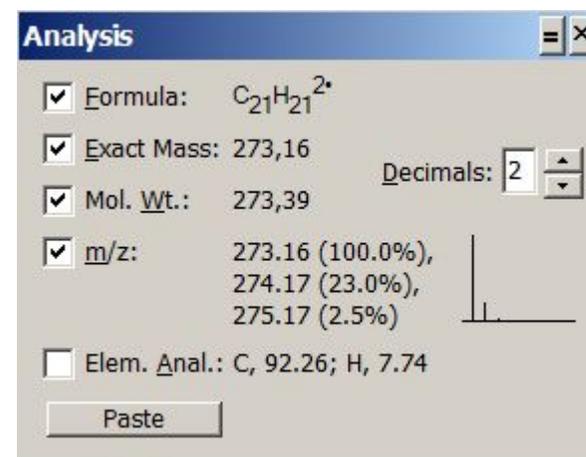


Главное меню

File / List Nicknames... открывает окно, в котором можно выбрать молекулярную структуру и вставить её в документ



View / Show Analysis Window – для выделенной структуры выдаёт окно с информацией о веществе



Полученную информацию можно вставить в документ



Главное меню

View / Show Chemical Properties Window – для выделенной структуры выдаёт окно со свойствами вещества

Полученную информацию можно вставить в документ

Property	Value
<input checked="" type="checkbox"/> Boiling Point:	386,44 [K]
<input checked="" type="checkbox"/> Melting Point:	194,57 [K]
<input checked="" type="checkbox"/> Critical Temp:	617,34 [K]
<input checked="" type="checkbox"/> Critical Pres:	41,14 [Bar]
<input checked="" type="checkbox"/> Critical Vol:	319,5
<input checked="" type="checkbox"/> Gibbs Energy:	120,47 [kJ/mol]
<input checked="" type="checkbox"/> Log P:	2,52
<input checked="" type="checkbox"/> MR:	31,17
<input checked="" type="checkbox"/> Henry's Law:	0,61
<input checked="" type="checkbox"/> Heat of Form:	48,72 [kJ/mol]
<input checked="" type="checkbox"/> tPSA:	0
<input checked="" type="checkbox"/> CLogP:	2.414
<input checked="" type="checkbox"/> CMR:	3.0637

Paste Report

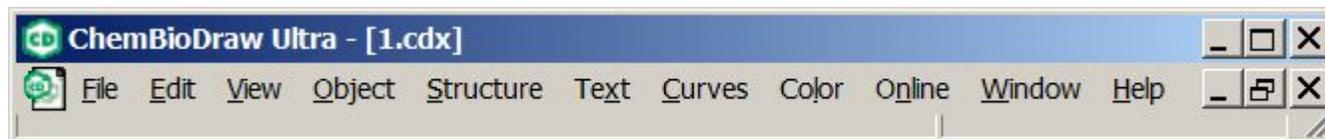
View / Show Periodic Table Window – выдаёт периодическую систему элементов Менделеева

Выбрав элемент и нажав кнопку, можно вывести сведения об этом элементе

H																	He
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
Fr	Ra	Ac	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg							
		Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu		
		Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr		

>>

Главное меню



Structure / Convert Name to Structure –
выделенное название конвертируется
в молекулярную структуру

Structure / Convert Structure to Name –
для выделенной структуры её название

Edit / Get 3D Model –
для структуры создаётся объемная модель

Программа ChemBio3D Ultra



Программа ChemBio3D предназначена для трёхмерного моделирования и визуализации молекулярных структур.

Building →

Standard →

Model Display →

Demo →

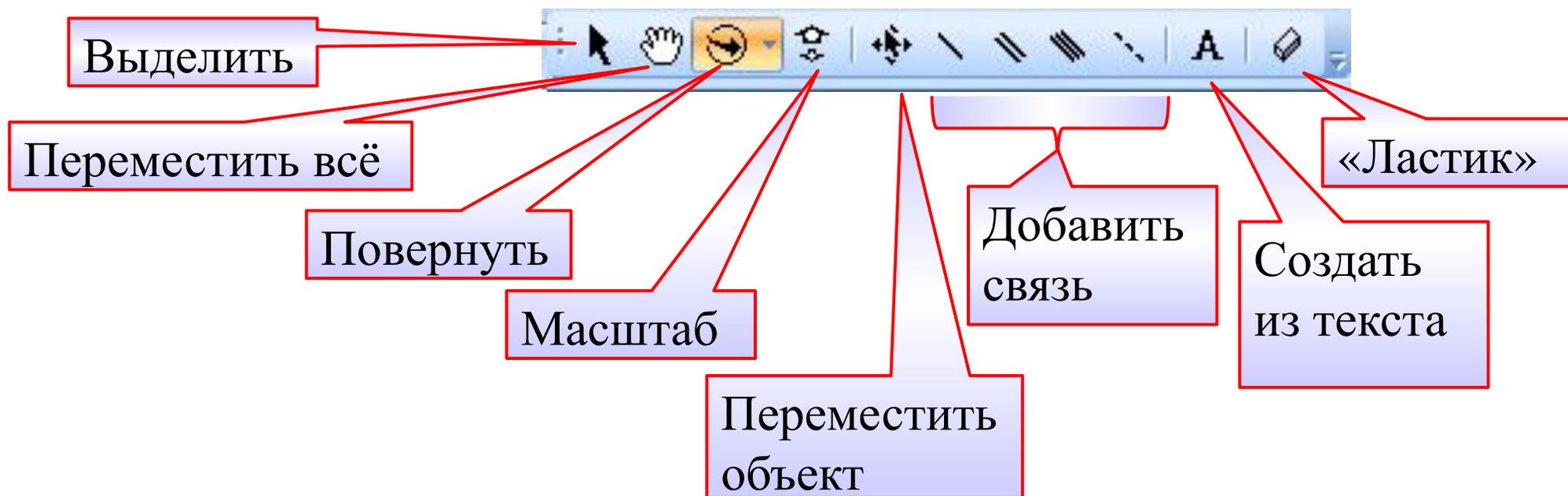
Рабочее окно программы ChemBio3D Ultra 12.0

Стрелками показаны панели инструментов (Toolbars)



Панель Building

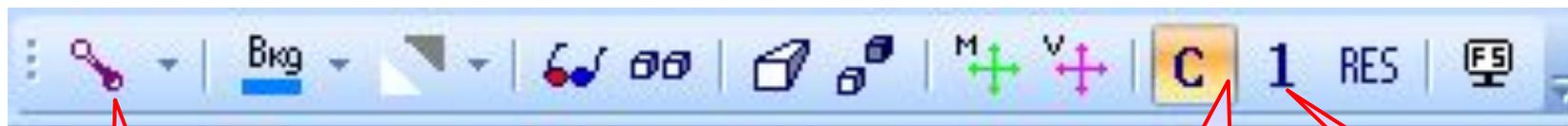
Инструменты этой панели позволяют создавать и редактировать трёхмерные модели молекулярных структур





Панель Model Display

Служит для настройки параметров изображения трёхмерной модели



Варианты
представления
трехмерной
модели

Цвет фона,
цветовые
эффекты
фона

Символы
атомов

Номера
атомов

Примечание. Все эти и ещё большие возможности доступны в главном меню (пункт **View / Model Display**)



Панель Demo

Служит для настройки вариантов демонстрации трёхмерной модели



Вращение

Выбор
оси

Амплитуда

Стоп

Покачивание

Скорость

Примечание. Эти же команды можно вызвать из главного меню
(пункт **View / Demo**)

Ещё несколько команд Главного меню



Structure / Measurements – инструменты для измерения длины связей и углов между связями

Generate All Bond Lengths – измерить длины связей

Generate All Bond Angles – измерить углы между связями

Generate All Dihedral Angles – измерить двугранные углы

Результаты измерений будут отображаться в окне **Measurement** в поле **Actual**, где их при необходимости можно изменить.

Поставив галочку в поле **Display**, можно отобразить соответствующее измерение непосредственно на модели

	Display	Atoms	Actual (° /	Optimal (° /
1	<input type="checkbox"/>	H(7)-O(4)	0.9420	0.9420
2	<input checked="" type="checkbox"/>	H(6)-O(1)	0.9420	0.9420
3	<input type="checkbox"/>	S(2)-O(5)	1.4536	1.4500
4	<input type="checkbox"/>	S(2)-O(3)	1.4537	1.4500
5	<input type="checkbox"/>	S(2)-O(4)	1.6929	
6	<input type="checkbox"/>	O(1)-S(2)	1.6930	
7	<input type="checkbox"/>	H(7)-O(4)-S(2)	109.5000	
8	<input type="checkbox"/>	O(5)-S(2)-O(3)	114.7948	116.6000
9	<input type="checkbox"/>	O(5)-S(2)-O(4)	108.4929	
10	<input type="checkbox"/>	O(5)-S(2)-O(1)	108.5380	
11	<input type="checkbox"/>	O(3)-S(2)-O(4)	108.6153	
12	<input checked="" type="checkbox"/>	O(3)-S(2)-O(1)	108.4869	
13	<input type="checkbox"/>	O(4)-S(2)-O(1)	107.6971	
14	<input type="checkbox"/>	H(6)-O(1)-S(2)	109.5000	

Как можно создавать трёхмерную модель



1-й способ – непосредственно в рабочем окне с помощью инструментов панели **Building**

2-й способ – по брутто-формуле соединения

- ✓ Щелкнуть по кнопке **A** на панели **Building**
- ✓ Щелкнуть в рабочем окне
- ✓ В появившемся текстовом поле написать брутто-формулу соответствующего соединения
- ✓ После нажатия Enter будет создана трёхмерная модель

3-й способ – по двумерной модели, созданной в **ChemDraw**

- ✓ Выделить и скопировать двумерную модель из **ChemDraw**
- ✓ Вставить в рабочее окно **Chem3D**
- ✓ Модель автоматически преобразуется в трёхмерную

Как скопировать 3D-модель в окно ChemDraw?

Меню **Edit / Copy As / ChemDraw Structure**

Как редактировать трёхмерную модель



- ✓ Щелкнуть по кнопке **A** на панели **Building**
- ✓ Щелкнуть по атому, который нужно заменить
- ✓ В появившееся текстовое поле ввести символ нового атома
- ✓ После нажатия клавиши **Enter** произойдут изменения

