

# ***ПРОГРАММА CHEM3D***

Презентация по дисциплине: «Теоретические и экспериментальные методы и исследования в химии»

Выполнили: ст.гр. МОС-18-01

Галеева А.Ф.

Р.

Габдрахимова Э.

Проверил: ассистент кафедры НХТ

Гриднева К.А.

Уфа 2018

# *ПРОГРАММНЫЕ СРЕДСТВА CHEMOffice*

Универсальный пакет программных средств ChemOffice фирмы CambridgeSoft Corporation является одним из наиболее популярных во многих химических лабораториях различных стран мира.



# ПРОГРАММА CS CHEM3D

Программа CS Chem3D

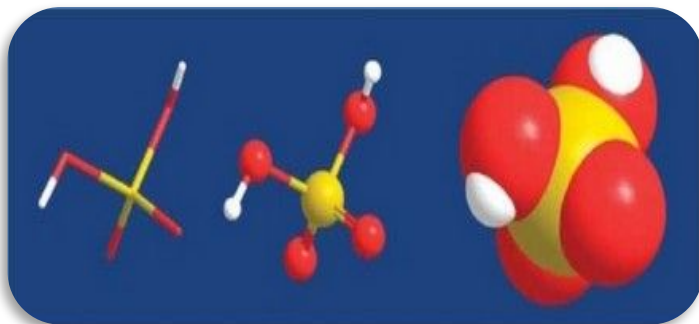
предназначена для  
визуализации химических  
соединений, компьютерного  
моделирования и расчетов.



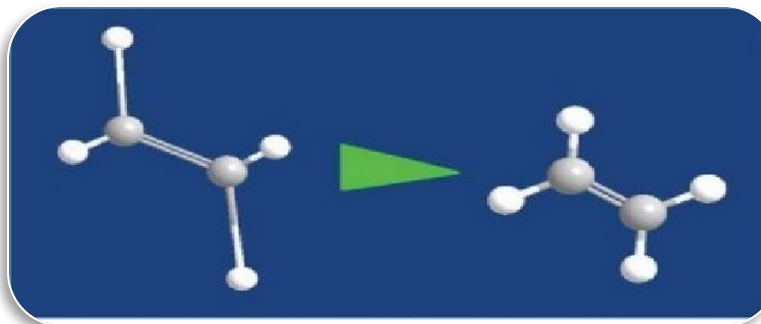
# ВИЗУАЛИЗАЦИЯ ПРОСТРАНСТВЕННОЙ СТРУКТУРЫ МОЛЕКУЛ

Модель серной кислоты  $\text{H}_2\text{SO}_4$ :

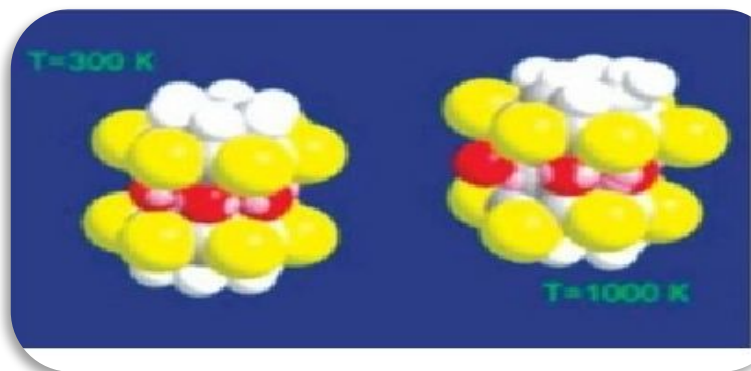
- а) стержневая, б) шаростержневая
- в) Вандер-ваальсова



Так выглядела бы молекула  
этилена ( $\text{C}_2\text{H}_4$ ) на самом  
деле

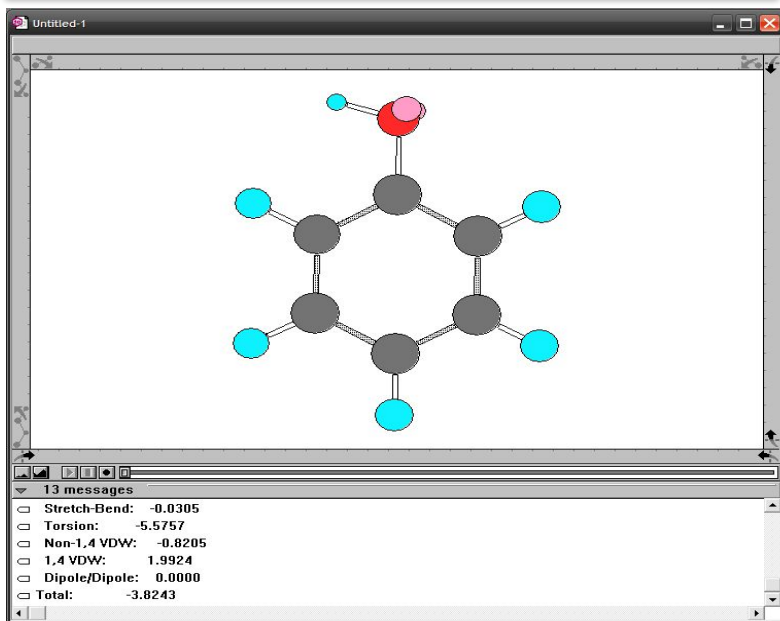


Наш логотип нагретый до  
1000K



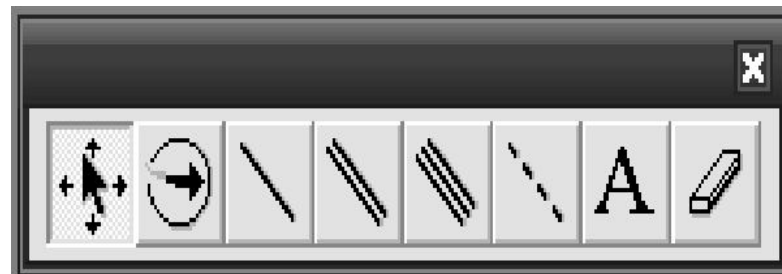
# ВИЗУАЛИЗАЦИЯ МОЛЕКУЛЯРНЫХ СТРУКТУР С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ПРОГРАММЫ Chem3D

Программа Chem3D позволяет осуществлять полное трехмерное моделирование и визуализацию химических соединений.



Рабочее окно программы Chem 3D

Панель инструментов программы Chem 3D предлагает набор простых инструментов для создания и корректировки моделируемых структур в рабочей области.



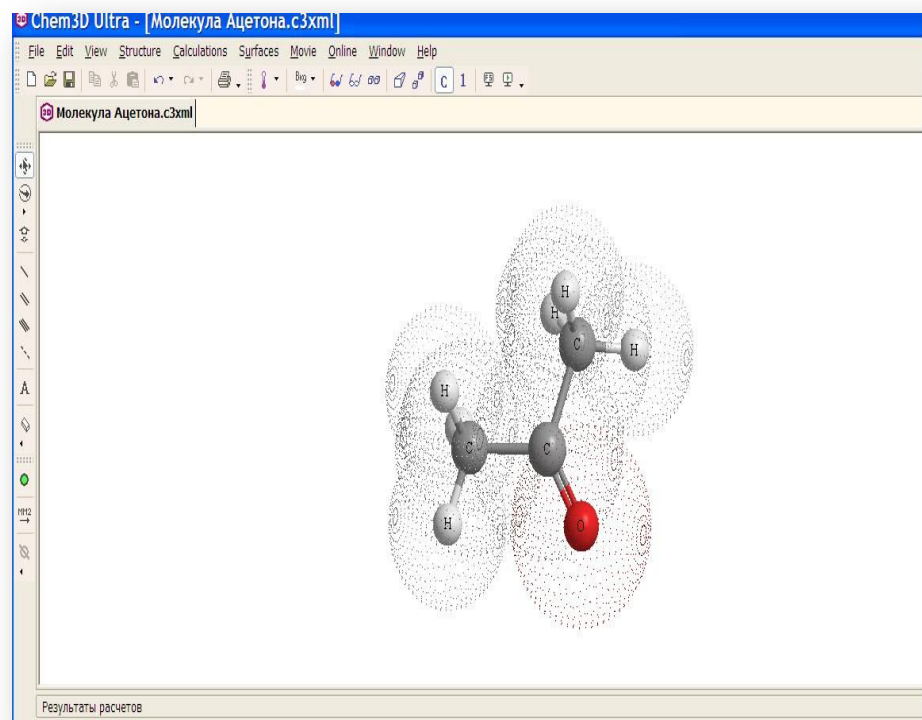
Панель инструментов программы Chem 3D

# ГРАФИЧЕСКИЙ ИНТЕРФЕЙС ПРОГРАММЫ CHEM3D

Основные элементы пользовательского интерфейса можно разделить следующим образом:

- главное меню;
- главная панель;
- контрольная панель.

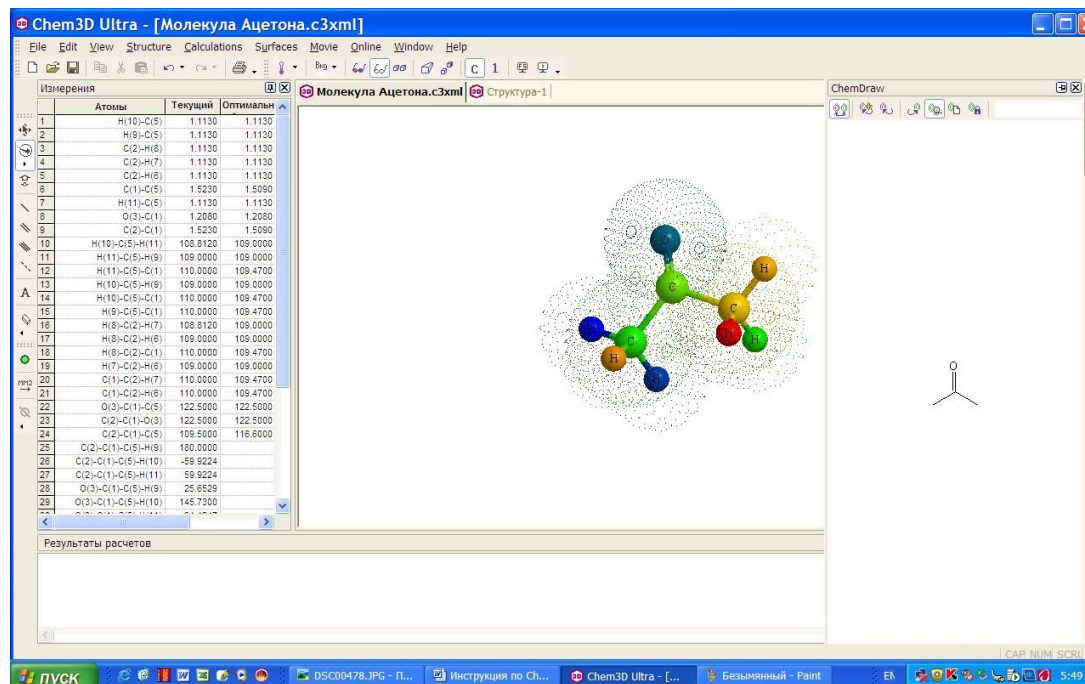
В центре экрана располагается рабочее окно, в котором отображается процесс создания и редактирования трехмерных моделей молекул.



Графический интерфейс программы

# ОСНОВНЫЕ ФУНКЦИИ ГЛАВНОГО МЕНЮ И ГЛАВНОЙ ПАНЕЛИ

- Пункт меню **Structure (Структура)** предлагает инструменты настройки отображения различных параметров молекулы, а также измерения длин связей, межатомных расстояний и углов.
- Пункт меню **Measurement (Измерения)** содержит выкидное подменю с пунктами: Bond Lengths (определить длины связей), Bond Angles (определить углы между связями), Dihedral Angles (определить двугранные углы), Close Contacts (определить ближайшие связи), Clear (Очистить весь список).





# *РЕДАКТИРОВАНИЕ И АНАЛИЗ ГЕОМЕТРИИ ТРЕХМЕРНЫХ МОДЕЛЕЙ МОЛЕКУЛ*

Существует несколько способов создания трехмерной молекулы химического соединения.

Двумерная модель в виде структурной формулы соответствующего химического соединения может быть создана в приложении ChemDraw или в любом другом «химическом редакторе», а затем скопирована через буфер обмена Windows при помощи операций «копировать» и «вставить».

При вставке в окно Chem3D структурная формула автоматически преобразуется в трехмерную модель, при этом соответствующим длинам валентных связей и углов между атомами присваиваются стандартные для данных элементов значения.



# *ПОЛЬЗОВАТЕЛЬСКИЙ ИНТЕРФЕЙС ПРОГРАММЫ*

## *CHEM3D*

- Пункт меню File (Файл)** содержит стандартный набор возможностей для открытия, сохранения и печати файлов.
- Пункт меню Edit (Правка)** также предоставляет обычный набор функций копирования, вставки, отмены последнего действия и выбора.
- Пункт меню View (Вид)** предоставляет широкий ассортимент настроек вида молекул / связей / панелей и т.д.
- Пункт меню Tools (Инструменты)** предлагает инструменты отображения различных панелей, меню, функции масштабирования и отражения молекулы.
- Пункт меню Object (Объект)** предлагает инструменты настройки отображения различных параметров молекулы, а также измерения длин связей, межатомных расстояний и углов.
- Пункт меню Analyze (Анализировать)** предлагает инструменты анализа молекул и расчета их свойств.
- Пункты меню MM2 (Молекулярная механика), Gamess, Gaussian и МОРАС** предлагают методы расчета потенциальной энергии молекул и прочих характеристик эмпирическими, полуэмпирическими и неэмпирическими квантово-механическими методами.

# ПУНКТ МЕНЮ *FILE* (ФАЙЛ)

● Пункт New Model (Новая модель) открывает новое окно пользователя. С, что Chem3D работает в многооконном режиме.

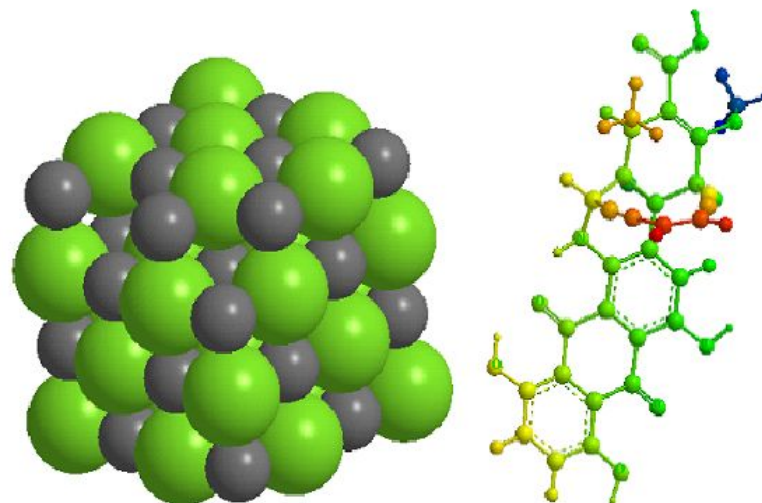
□ Пункт Templates (Заготовки) предлагает открыть новое окно с уже заданными настройками (например, цвет фона или способ отображения молекул) или с заготовками моделей молекул. Например, динамицин А и кристалл NaCl.

□ Пункты Open/Close Window/Save/Save As. (Открыть / Закрыть окно / Сохранить / Сохранить как...) представляют собой стандартные функции открытия, закрытия и сохранения файлов.

□ Пункт Revert to Saved (Вернуться к сохраненному) убирает все изменения после последнего сохранения.

□ Пункт Set Default Settings (По умолчанию) использует установки данной модели для новой модели.

□ Пункты Print/Print Setup (Печать / Настройка) открывает стандартное диалоговое окно для настройки и последующей распечатки файла.



Динамицин А и кристалл NaCl

# ПУНКТ МЕНЮ EDIT (ПРАВКА)

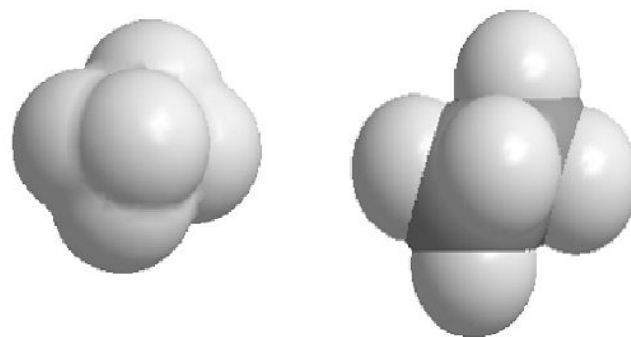
- Пункт Undo/Redo (Отменить /Вернуть) отменяет или, наоборот, возвращает изменения последнего действия.
- Пункт Cut (Вырезать) вырезает выбранный элемент молекулы / текст и копирует его в буфер обмена.
- Пункт Copy (Копировать) копирует выбранный элемент молекулы / текст в буфер обмена.
- Пункт Paste (Вставить) выбранный элемент молекулы / текст из буфера обмена.
- Пункт Clear (Очистить) удаляет выбранный элемент / текст.
- Пункт Copy As (Копировать как...) позволяет копировать выделенное как ChemDraw - структуру или растр (Bitmap)
- Пункт Select All (Выбрать все) выбирает все элементы.
- Пункт Select Atoms (Выбрать атомы) позволяет выбирать атомы по определенному признаку: Revers (Выбрать невыбранные, т.е. обратить выделение), Select C (Выбрать все атомы одного элемента), Select Adjacent (Выбрать все атомы, смежные к данному), Select Fragment (Выбрать все атомы данного фрагмента).
- Пункты Clear Frames/ Molecular Surfaces/Calculations (Очистить) позволяет очистить кадры / молекулярные поверхности / расчеты.

# ПУНКТ МЕНЮ *VIEW* (Вид)

□ Первый раздел включает три пункта: галочку Toolbar (Главная панель), включающую отображение главной панели; галочку Tools Palette (Контрольная панель), отображающую видимость контрольной панели, и пункт Settings (Настройки), выводящий диалоговое окно настройки вида молекул.

□ Второй раздел объединяет пункты, с помощью которых можно визуализировать различные расчетные характеристики молекулярной модели.

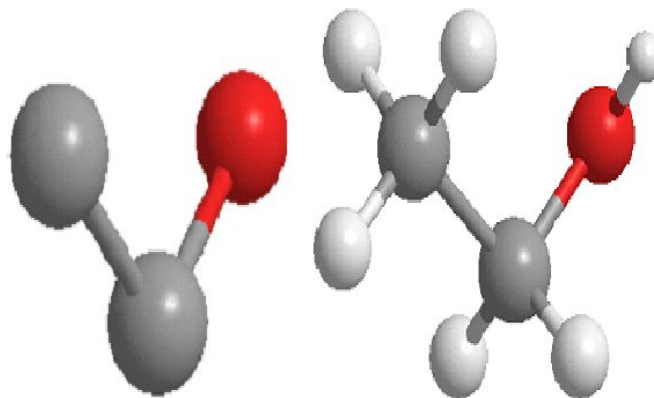
□ В последнем разделе пункта меню View приведены ссылки на таблицы с параметрами, используемыми в расчетах.



Модель молекулы бутана (а) и поверхность доступная растворителю с разрешением 40 (б)

## ПУНКТ МЕНЮ *TOOLS* (ИНСТРУМЕНТЫ)

- Функции Magnify (Увеличить) и Reduce (Уменьшить) соответственно изменяют масштаб молекулы в окне визуализации.
- Функция Rectify (Исправить) проверяет наличие в молекуле связей, согласно химическим правилам.
- Функция Clean Up Structure (Очистить) проверяет соответствие в модели молекулы длин связей и валентных углов принятым в химии стандартным значениям.
- Функция Dock (Стыковать) ориентирует один фрагмент относительно другого.
- Функция Overlay (Покрыть) покрывает один фрагмент другим с помощью атомных пар.



Модель молекулы этилового спирта: а) отображение атомов водорода и неподелённых электронных пар; б) выключено

# РЕДАКТИРОВАНИЕ И АНАЛИЗ ГЕОМЕТРИИ ТРЕХМЕРНЫХ МОДЕЛЕЙ МОЛЕКУЛ

Существует несколько способов создания трехмерной модели химического соединения:

- Использование двумерной модели, созданной в одном из простых химических редакторов;
- Написание брутто-формулы соединения в рабочем поле окна;
- Непосредственное редактирование с использованием кнопок на панели инструментов;



Визуализация изомеров координационного иона  $[\text{Pt}(\text{NH}_3)_4\text{ClBr}]^{2+}$

## *ЗАКЛЮЧЕНИЕ*

Chem3D – программа для создания и просмотра трехмерных химических структур, имеет встроенный плагин ChemDraw, который позволяет по структурной формуле, написанной на экране, построить трехмерную химическую структуру. Кроме того, программа рассчитывает физические свойства химических структур различными квантово-химическими методами (ММ3, МОРАС, метод Хюккеля и др.)



## СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

- Литвак М.М., Использование программного пакета Chem Office в преподавании биоорганической химии / Современные проблемы науки и образования. – 2008. – № 4 – с. 34-38
- Авдеева Л.В., Сидоров В.В. Методические указания по изучению программного комплекса ChemOffice. - 2012.
- Форум химиков на XuMuK.ru. [Электронный ресурс]. – М., 2016 –. – Режим доступа: <http://forum.xumuk.ru/topic/339-chem3d/> – Загл. с экрана.
- Визуализация молекулярных структур с использованием программы Chem3D пакета ChemOffice . [Электронный ресурс]. – М., 2016 –. – Режим доступа:  
[https://studbooks.net/2265590/matematika\\_himiya\\_fizika/vizualizatsiya\\_molekul\\_yarnyh\\_struktur\\_ispolzovaniem\\_programmy\\_chem3d\\_paketa\\_chemoffice](https://studbooks.net/2265590/matematika_himiya_fizika/vizualizatsiya_molekul_yarnyh_struktur_ispolzovaniem_programmy_chem3d_paketa_chemoffice) – Загл. с экрана.
- Научные программы [Электронный ресурс]. – М., 2015 –. – Режим доступа: [https://itc.ua/articles/nauchnye\\_programmy\\_21161/](https://itc.ua/articles/nauchnye_programmy_21161/) – Загл. с экрана.
- ChemOffice Pro. [Электронный ресурс]. – М., 2014 –. – Режим доступа: <https://allsoft.ru/software/vendors/perkinelmer-informatics/chemoffice-pro/> – Загл. с экрана.
- Моделирование структуры химических соединений с помощью пакетов программ ACD/Chemsketch, Chemoffice, Hyperchem. Манаенков О.В., Косивцов Ю.Ю., Сульман Э.М. Учебное пособие. — Тверь: ТвГТУ, 2013. — 84 с.

***СПАСИБО ЗА ВНИМАНИЕ!***