

NIST Molecular Editor

Из имеющихся в WWW инструментов подобного назначения апплет *NIST* характеризуется, по-видимому, самым простым строением.

The screenshot shows the NIST Molecular Editor interface. At the top, there is a menu bar with buttons for 'Mode: Select', 'Draw', 'Erase', 'Template', 'Draw Element' (with a dropdown menu showing 'H'), 'Text', and 'Done...'. Below the menu bar is a large drawing area containing a chemical structure of salicylic acid (2-hydroxybenzoic acid). The structure consists of a benzene ring with a hydroxyl group (-OH) and a carboxyl group (-COOH) attached to adjacent carbons. Annotations in Russian point to various parts of the interface: 'Кнопки переключения режимов' (Mode switching buttons) points to the 'Mode' section; 'таблица шаблонов' (template table) points to the 'Template' button; 'список химических элементов' (list of chemical elements) points to the 'Draw Element' dropdown; 'вывод MOL-файла в текстовом формате' (output MOL file in text format) points to the 'Text' button; 'Кнопка "Готово"' (Done button) points to the 'Done...' button; 'Ничего страшного, если рисунок будет выглядеть не очень симпатичным' (Nothing scary if the drawing doesn't look very nice) points to the chemical structure; and 'Апплет автоматически определяет брутто-формулу' (Applet automatically determines the gross formula) points to the formula 'C7H6O3' displayed at the bottom left. The bottom status bar shows 'C7H6O3', 'Draw Mode', and 'NIST Molecule Editor'.

Кнопки переключения режимов

таблица шаблонов

список химических элементов

вывод MOL-файла в текстовом формате

Кнопка "Готово"

Ничего страшного, если рисунок будет выглядеть не очень симпатичным

Апплет автоматически определяет брутто-формулу

Mode: Select Draw Erase Template Draw Element H Text Done...

C7H6O3 Draw Mode NIST Molecule Editor

Апплет работает в нескольких режимах (*Mode*), которые включаются кнопками:

- **Select** — выделить,
- **Draw** — рисовать,
- **Erase** — стереть,
- **Template** — шаблоны.

Во всех режимах атом или связь можно выделить, установив курсор над ним (ней).

Draw — режим рисования.

Химическая структура наращивается тем атомом, который выбран в списке *Draw Element*.

- **Отобразить** атом — щелкнуть по полю.
- **Добавить второй атом, связанный** с первым — установить курсор на первый атом, нажать левую клавишу мышки и, не отпуская, тянуть курсор в нужном направлении на нужное расстояние, после чего клавишу отпустить.
- **Создать связь** между атомами — установить курсор на первый атом, нажать левую клавишу мышки и, не отпуская, перенести курсор на второй атом, после чего клавишу отпустить.
- **Изменить порядок связи** — установить курсор на связь и щелкать клавишей мышки нужное число раз.
- **Изменить свойства атома** — двойным щелчком по атому открыть вспомогательное окошко, в котором сделать необходимые замены.

Некоторые операции редактирования можно выполнять с помощью **клавиатуры**.

Список "горячих клавиш" приведен в таблице, расположенной на той же странице, где находится поисковый бланк.

Пример: заменить в структуре атом углерода на атом азота.

Выполнение операции с помощью клавиатуры: установить курсор на атом углерода и нажать клавишу n.

Select — режим выделения.

Выделенный атом можно передвигать в нужном направлении.

Остальные действия над атомами и связями такие же, как в режиме Draw.

Erase — режим стирания.

Для удаления атома или связи необходимо щелкнуть по нему (ней).

Template — режим шаблонов (циклов).

- **Выбрать** цикл из таблицы — щелкнуть по нему.
- **Отобразить** этот цикл — щелкнуть в нужном месте редактируемого поля.
- **Добавить** нужный цикл к структуре — установить курсор на атом или связь и щелкнуть клавишей мышки.
(Проверьте, как добавляется цикл при щелчке по *атому* и как — при щелчке по *связи*).

Об атомах водорода.

По умолчанию предполагается, что атомы водорода присутствуют в изображаемой структуре в **неявной** форме в соответствии с правилами валентности.

Например, молекула $\text{H}_3\text{C}-\text{CH}_3$ по умолчанию отображается так: —

Для показа атомов водорода в **явной** форме необходимо установить курсор на неводородный атом и на клавиатуре нажать соответствующую цифровую клавишу.

Тренировочное упражнение.

Изобразите этан в такой форме: $\text{H}_3\text{C}-\text{CH}_3$

Изобразите этил в такой форме: $\text{H}_3\text{C}-\text{CH}_2$

Явная и неявная формы отображения водорода **по-разному интерпретируются в ходе субструктурного поиска.**

Неявно присутствующий водород никак **не учитывается** в ходе субструктурного поиска.

Например, по запросу $\text{C}-\text{C}$ извлекаются все структуры, содержащие два атома углерода, соединенные одинарной связью.

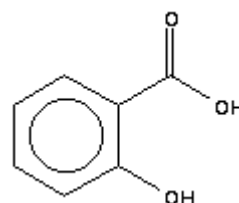
Явно присутствующий водород **учитывается** в субструктурном поиске.

Например, по запросу $\text{H}_3\text{C}-\text{CH}_2$ извлекаются все структуры, содержащие группировку C_2H_5 .

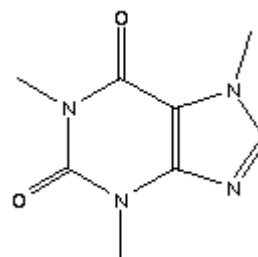
Выбор "поиск по структуре" или "поиск по субструктуре" проводится после нажатия кнопки **Done** ("Готово").

Контрольные задания.

1. Определите температуру плавления этого вещества:

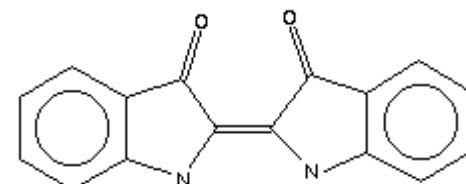


2. Определите энергию ионизации (eV) этой молекулы в газовой фазе:



3. Проведите субструктурный поиск по такому запросу:

Чему равна энтальпия сублимации бромпроизводного, имеющегося в списке результатов поиска?



Результаты запишите на листе бумаги и сдайте преподавателю.