


ACD/3D Viewer

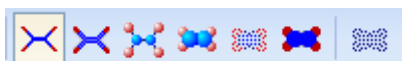
Программа **ACD/3D Viewer** может быть загружена двумя способами:

- Если не загружена программа *ChemSketch*:
Программы -> ACDLABS 12.0 -> 3D Viewer
- Если загружена программа *ChemSketch*:
на ее верхней панели щелкнуть по значку 

При одновременно работающих программах *ChemSketch* и *ACD/3D Viewer* в левом нижнем углу окна имеются кнопки для переключения между обоими окнами:

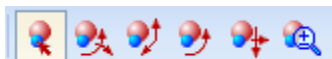
Для переноса информации из *ChemSketch* в *ACD/3D Viewer* и обратно служит кнопка *2-Copy to...*



- Кнопки изменения типа структуры, в том числе, отображения ван-дер-ваальсовой поверхности.

Упражнение 1.

Изобразите в *ChemSketch* структурную формулу этана, проведите 3D-оптимизацию, перенесите информацию в *ACD/3D Viewer* и рассмотрите все возможные варианты отображения структуры.



- Кнопки управления: выделение, вращение, перемещение структур.

Упражнение 2.

На примере молекулы этана проверьте назначение кнопок управления.



- Кнопки измерения межъядерных расстояний, валентных и двугранных углов.

Внимание!

Программы, о которых здесь идет речь, **моделируют** химическую структуру.

Измеряемые молекулярные параметры — **расчетные, но не экспериментальные**.

Упражнение 3.

На примере молекулы этана проверьте назначение измерительных кнопок.

Конформации молекул

В ходе генерирования трехмерной структуры программа создает и выводит на экран только одну конформацию молекулы.

При наличии нескольких минимумов на кривой потенциальной энергии программа выбирает — в идеальном случае — самый глубокий минимум. Если молекула имеет несколько близких по энергии низкоэнергетических конформаций, пользователь получает одну из них, и не обязательно ту, которую он ожидал увидеть.

Остальные конформации тоже можно сгенерировать, но для этого придется немного поработать вручную.

Для создания второй конформации используем то, что:

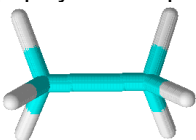
- результат моделирования может зависеть от исходных координат атомов;
- программа позволяет перемещать в трехмерном пространстве не только структуру в целом, но и ее фрагмент.

Для перемещения фрагмента структуры следует:

- выделить перемещаемые атомы,
- в меню *Edit* выбрать параметр *Manipulate Selected*,
- после чего — манипулировать избранным фрагментом.

Упражнение 4.

По умолчанию, программа из структурной формулы генерирует заслоненную конформацию этана:



Наша задача будет состоять в превращении заслоненной конформации в заторможенную:

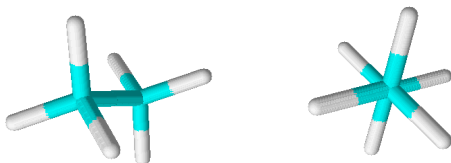


Схема работы:

- В *ChemSketch* нарисуйте структурную формулу этана, там же проведите 3D-оптимизацию, скопируйте структуру в *3D Viewer*.
На экране вы увидите модель заслоненной конфигурации этана.
- Разверните исходную структуру вокруг оси u на 90° (так, чтобы связь C–C оказалось перпендикулярной плоскости экрана).
- Выделите три ближайшие к вам атома водорода (*внимание!* атом C выделять не надо).
- В меню *Edit* выберите параметр *Manipulate Selected*.
- Поверните в плоскости xy выделенные атомы водорода на 60° .
- Вращая модель в трехмерном пространстве, убедитесь, что задача выполнена верно.

Примечание.

Предыдущее упражнение мы выполняли в ознакомительных целях.

Если проводить 3D-оптимизацию заслоненной конформации этана в окошке 3D Viewer, программа сама автоматически генерирует энергетически более выгодную заторможенную конфигурацию.

Контрольное задание.

Создайте трехмерную модель молекулы оксида фосфора(V).
Результат предъявите преподавателю.