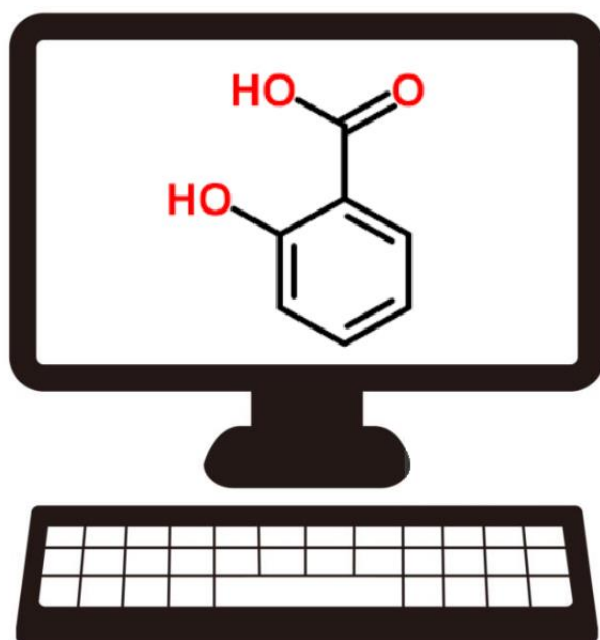


Комунальний заклад вищої освіти
«Дніпровська академія неперервної освіти»
Дніпропетровської обласної ради»

Кафедра математичної, природничої та технологічної освіти

ЗАСТОСУВАННЯ РЕДАКТОРА ХІМІЧНИХ ФОРМУЛ ACD/ChemSketch У НАВЧАЛЬНО – МЕТОДИЧНІЙ РОБОТІ



Київ – 2025 р.

УДК 547(07)

Рекомендовано Вченою радою Комунального закладу вищої освіти «Дніпровська академія неперервної освіти» Дніпропетровської обласної ради», протокол № 4 від 11.12. 2024 року

Укладач: **Руслан СЛОБОДНЮК**, кандидат технічних наук, викладач Дніпровського технологічно-економічного фахового коледжу

Рецензенти:

Олександр ІВАНОВ, кандидат технічних наук, доцент кафедри «Комп'ютерні інформаційні технології» Українського державного університету науки і технології;

Віктор ШВИДУН, кандидат педагогічних наук, доцент, директор навчально-наукового інституту педагогіки комунального закладу вищої освіти «Дніпровська академія неперервної освіти Дніпропетровської обласної ради»;

Лариса СВИРИДЕНКО, викладач хімічних дисциплін, викладач-методист Дніпровського політехнічного фахового коледжу, голова методичного об'єднання викладачів хімічних дисциплін закладів фахової передвищої освіти м. Дніпро

Слободнюк Р. Є. Застосування редактора хімічних формул ACD/ChemSketch у навчально-методичній роботі: метод. посіб. – К. : ФОП Гуляєва В.М., 2025. – 43 с.

У навчальному виданні розглянуто характеристику можливостей редактора хімічних формул ACD/ChemSketch. Описано інтерфейс та основи роботи з цією програмою. У посібнику розглянуто основні способи створення структурних формул різних класів органічних речовин та рисунків хімічного обладнання. Посібник містить контрольні завдання для практичного застосування умінь і навичок роботи з редактором структурних формул. Видання призначене для вчителів та викладачів хімії.

ISBN 978-617-8181-28-4	© УДК 547(07) КЗВО «ДАНО» ДОР»
------------------------	-----------------------------------



ЗМІСТ

ВСТУП.....	4
1. Загальна характеристика редактора ChemSketch.....	5
2. Налаштування роботи програми в режимі Structure.....	13
3. Складання структурних формул аліфатичних вуглеводнів.....	14
3.1. Побудова структурних формул алканів.....	15
3.2. Побудова структурних формул вуглеводнів із кратними зв'язками.....	18
3.3. Побудова структурних формул циклоалканів.....	18
4. Нумерація атомів Карбону в ланцюгах.....	19
5. Складання структурних формул аренів.....	20
6. Складання структурних формул сполук з функціональними групами.....	22
7. Складання формул полімерів.....	23
8. Робота із шаблонами.....	24
9. Складання хімічних рівнянь в редакторі ChemSketch.....	26
10. Написання формул йонів та радикалів.....	28
11. Моделювання 3D структур.....	29
12. Розрахунок відносної молекулярної маси та масової частки елементів в речовині	30
Завдання для самоконтролю.....	32
ЛІТЕРАТУРА.....	42



Робота сучасного педагогічного працівника неможлива без застосування інформаційних технологій. Якість проведення уроків залежить від різноманітних навчальних програм, що застосовуються педагогом для проведення освітнього процесу. Для підготовки методичних матеріалів зазвичай використовують цифрові технології, що створюють текстові документи, ілюстрації. Текстовий редактор Word містить модулі, що дозволяють на сучасному рівні відображати математичні формули. У цьому редакторі зручно записувати хімічні формули неорганічних речовин і рівнянь реакцій з їх участю. Можливості малювати структурні формули органічних речовин дають спеціалізовані редактори.

Розвиток інформаційних технологій дав поштовх для розвитку спеціалізованих хімічних редакторів, які успішно застосовуються в науковому середовищі та серед авторів підручників, в яких виникає необхідність відображати структурні формули органічних речовин.

У навчальній, методичній та науковій роботі викладача та вчителя хімії виникла необхідність відображати структурні формули на сучасному естетичному і науковому рівні. Редактор ChemSketch дає зручну і доступну можливість педагогу розв'язувати це питання. Крім загально прийнятого застосування редактора, його можна використовувати під час проведення занять у дистанційному та аудиторному режимі. При дистанційній формі навчання можна ввімкнути демонстрацію екрана і розглядати структурні формули органічних речовин на більш наочному рівні.

Опанування основних правил налаштування та застосування редактора ChemSketch буде до нагоди творчому педагогу.

1. Загальна характеристика редактора ChemSketch

ACD/ChemSketch Freeware for personal or academic use – пакет програмного забезпечення для малювання хімічних структур.

Авторське право: канадська фірма

Advanced Chemistry Development, Inc. – <http://www.acdlabs.com>

Програмне забезпечення є повністю безкоштовним і доступним для завантаження і використання. Для цього на сайті <http://www.acdlabs.com/resources/freeware/chemsketch> необхідно завантажити файл «chemsk12.exe». Далі необхідно провести інсталяцію файлу з погодженням з ліцензійними домовленостями.

ChemSketch – це програма, яка дає можливість будувати структурні формули органічних речовин, записувати схеми та рівняння хімічних реакцій, відображати положення молекули у просторі, малювати хімічне обладнання, посуд та багато інших можливостей.

Програма містить:

- ▶ таблицю радикалів;
- ▶ таблицю функціональних груп;
- ▶ Періодичну систему;
- ▶ шаблони молекул ароматичних вуглеводнів, гетероциклів, вуглеводів, амінокислот та інше;
- ▶ програму 3D Viewer, що дозволяє демонструвати об'ємні моделі молекул з можливістю їх руху.

Основні можливості програми:

- ▶ відображення структурних формул органічних речовин;
- ▶ нумерація атомів, зазначення валентності та ступенів окиснення;
- ▶ створення Маркуш-структур (структур зі змінними по кількості і складу замісниками);
- ▶ написання схем та рівнянь хімічних реакцій;
- ▶ перетворення структурної формули органічної речовини в динамічну 3D-модель;
- ▶ можливість проведення різного виду пошуку для певних хімічних структур;

- малювання приладів та хімічних установок;
- здійснення розрахунків відносної молекулярної маси, якісного та кількісного складу молекули, розрахунок деяких фізичних величин для сполуки;
- можливість збереження створених файлів у різних форматах (PDF, GIF, HTML та інших).

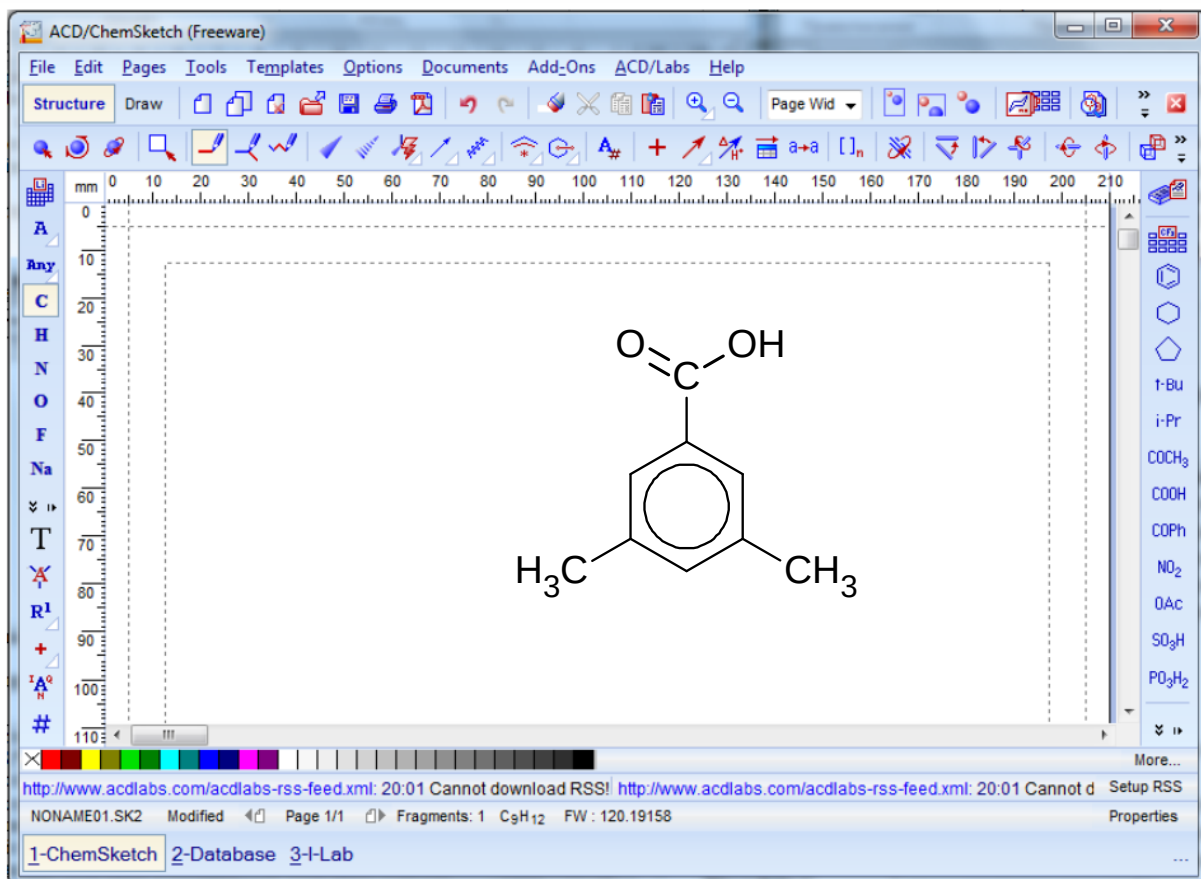


Рис. 1.1 – Структура робочого вікна хімічного редактора ChemSketch

У верхній частині під меню програми розташована панель інструментів. Вона дає можливість збереження файлів у різному форматі, дії – ВІДМІНА, ПОВТОР, МАСШТАБУВАННЯ, ВИРІЗАННЯ, ВИТИРАННЯ, ВИДАЛЕННЯ та МАСШТАБУВАННЯ.

Для роботи в програмі ChemSketch існують два режими: **Structure** (Структура) і **Draw** (Малювання) (Рис. 1.2 – 1.4).

Режим **Structure** призначений для малювання структурних формул органічних речовин, схем та рівнянь хімічних реакцій.

Режим **Draw** призначений для відображення графічних об'єктів, фігур, таблиць, текстових вставок, стрілок тощо.

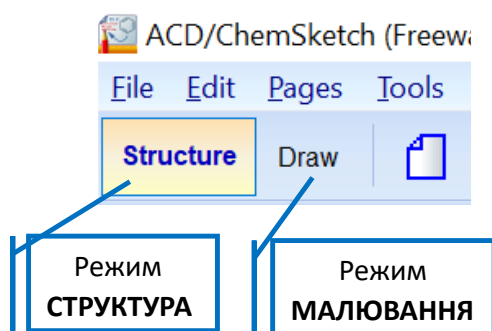


Рис. 1.2 – Режими роботи редактора ChemSketch

Режим Structure (Структура) дає можливість будувати структурні формули органічних речовин і схеми хімічних реакцій.

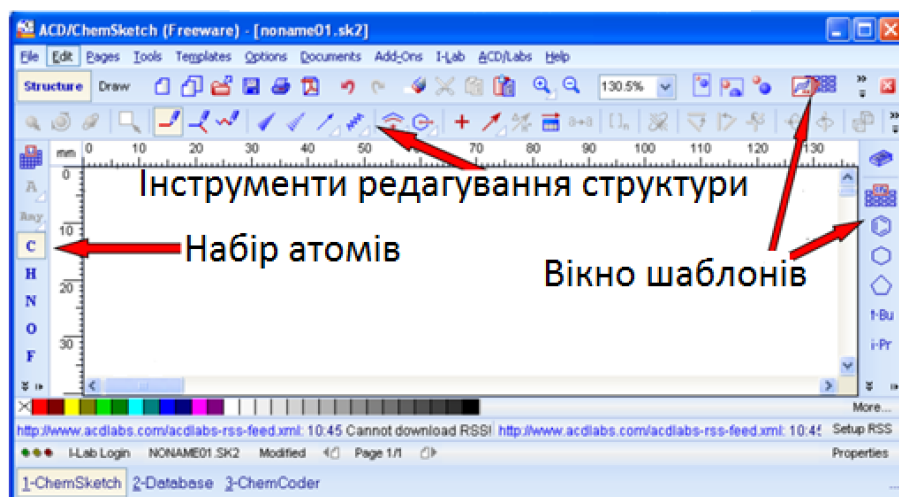


Рис. 1.3 – Інтерфейс режиму Structure

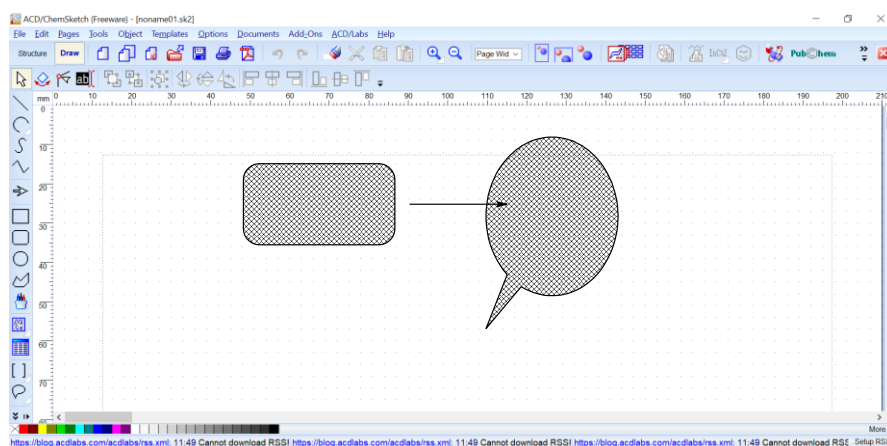


Рис. 1.4 – Інтерфейс режиму Draw

В лівій частині робочого стола розташована панель **Атоми**. Вона доступна до використання лише в режимі **Structure (Структура)**. В цій

панелі є доступ до Періодичної системи, інструменту нумерації атомів Карбону.

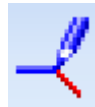
Режим **Drow** містить панель інструментів, що дає можливість рисувати різні фігури, текстові вставки, таблиці, різні за формою стрілки.

В лівій частині робочої зони розташована **Панель радикалів**. В ній є готовий набір радикалів, ароматичних структур, циклів, характеристичних груп. Працює ця панель лише в режимі **Structure**. Копіювати та вставляти готову формулу молекули зручно за допомогою інструментів  **Copy** та **Paste**.

Для побудови карбонового скелету, що є основою органічних сполук, користуються такими інструментами:
інструменти:



Draw Normal (Малювати нормально),



Draw Continuous (Малювати безперервно);



Draw Chains (Малювати ланцюжки).

Для малювання карбонового скелету слід на панелі атомів обрати символ атома Карбону. При кліканні на хімічні зв'язки вони перетворюються на подвійні, потрійні та знову одинарні.

Для малювання циклічних структур зручно користуватись інструментом **Draw Continuous**. Для утворення циклічної структури цикл, слід останній клік створити на першому атомі Карбону.

Також можна скористуватись інструментом **Draw Chains**. Для цього рисують карбоновий скелет з необхідним числом атомів Карбону, потім, за допомогою інструменту **Draw Normal**, сполучають перший атом Карбону з останнім. Щоб надати їм симетричної правильної форми використовують команду



Clean Structure.

Для того, щоб перетворити формулу Кекуле в ароматичну структуру користуються командою **Tools ► Show Aromaticity** (показати ароматику), а щоб повернутися назад використовують програму **Hide Aromaticity**.

Для побудови декількох циклічних структур, та ароматичних структур зручно користуватись шаблоном радикалів, що розташований праворуч. На панелі Атоми розташована команда **Edit Atom Label**.

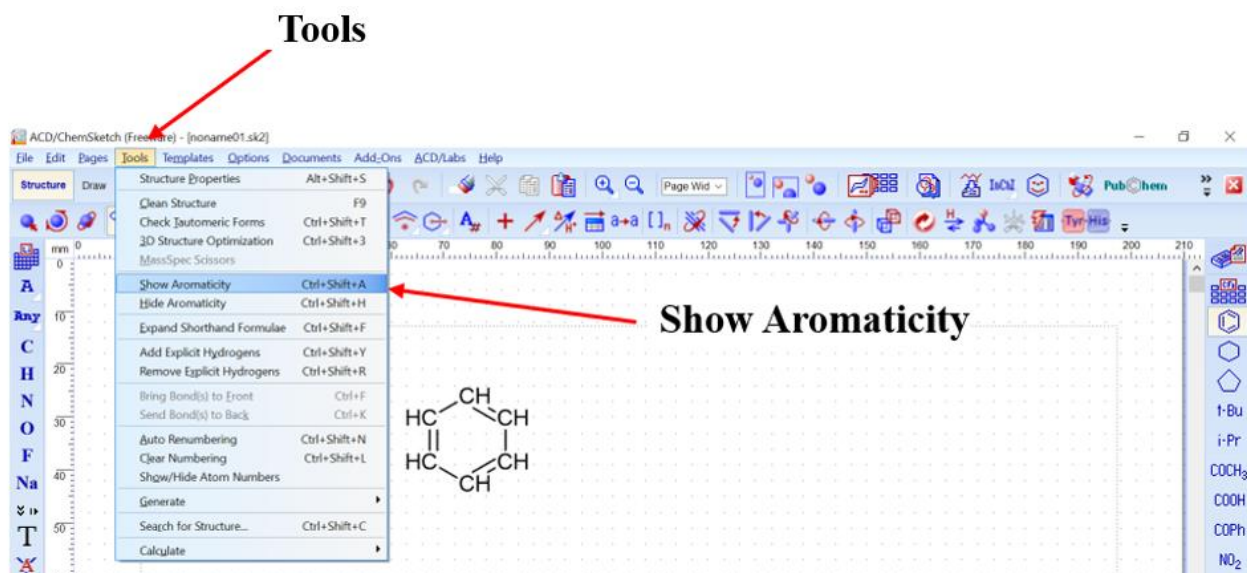


Рис. 1.5 – Перетворення формул Кекуле в ароматичну структуру

Для обертання формул, зміни їх положення у просторі користуються інструментом



Select/Move (Вибір/Переміщення).

Інструмент



Select/Rotate/Resize (Вибір/Обертання/Розмір) застосовується обертання структурної формули у площині.

Інструмент



3D-Rotation (3D-Обертання) призначений обертання структури у просторі. Можна змінювати положення структури або певного фрагмента відносно обраного зв'язку. Для цього використовують інструменти:



Set Bond Vertically (Встановити зв'язок вертикально), **Set Bond Horizontally** (встановити зв'язок горизонтально) і **Flip on Bond** (відобразити відносно зв'язку), **Flip** (Відображення зверху вниз та зліва направо) дозволяють змінювати розташування певної частини молекули відносно зв'язку. Для цього необхідно виділити всю молекулу, або її фрагмент.

Інструмент:



Change Position дозволяє змінити положення символів атома Гідрогену відносно атома Карбону. Для швидкого переходу до стандартного вигляду структури її необхідно виділити й скористатися інструментом



Clean Structure, що робить молекулу симетричною, вирівнює довжину зв'язків та величини валентних кутів. Використання інструмента



3D Optimisation призведе до повного розгортання структурної формули.

Відображення усіх атомів Гідрогену, зв'язаних з карбоновим скелетом структури, встановлюється за допомогою команди

Add Explicit Hydrogens меню **Tools** (Рис. 1.6).

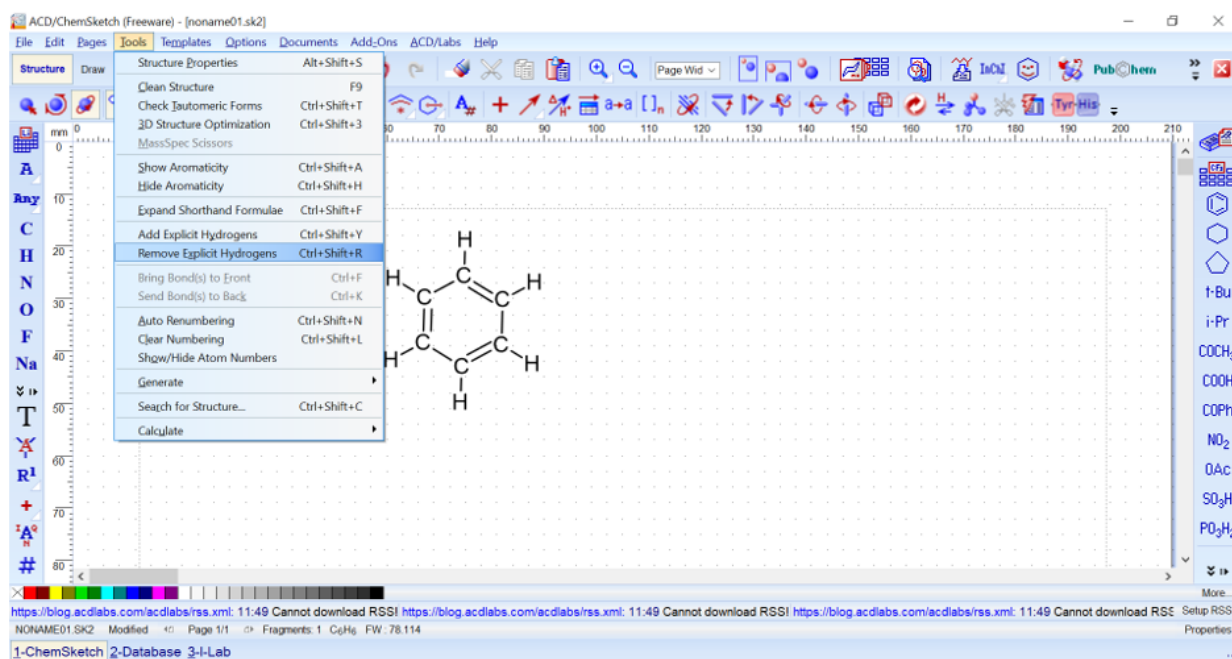


Рис. 1.6 – Команда **Add Explicit Hydrogens** меню **Tools**.

Команда **Remove Explicit Hydrogens** скасовувати цю дію.

Для генерування назви органічної сполуки за міжнародною системою

IUPAC користуються інструментом

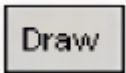
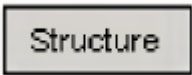
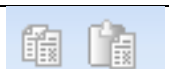


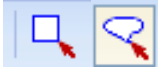
General Name for Structure.

Інструмент  **Up Stereo Bonds** і **Down Stereo Bonds** використовуються для стереозображення молекули у просторі, для цього натискають на відповідні хімічні зв'язки.

Таблиця 1

Головна панель інструментів

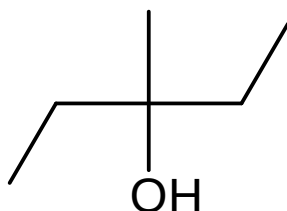
<i>Інструмент</i>	<i>Назва</i>	<i>Функції інструменту</i>
	Draw	Режим малювання фігур, стрілок, таблиць, текстових вставок.
	Structure	Режим малювання структурних формул органічних речовин
	New Document	Створити новий документ
	New Page	Створити нову сторінку
	Open File	Відкрити файл
	Save File	Зберегти файл
	Print	Надрукувати
	Export to PDF	Експортувати у формат*PDF
	Undo Change Bond / Redo	Скасовувати дію / Повернутись до дії
	Delete	Видалити
	Cut	Вирізати
	Copy / Paste	Копіювати / Вставити

	Zoom In / Zoom out	Збільшити / зменшити. Є функція збільшення виділеного фрагмента
	Full Page / Page Width / Fit All	Показати всю сторінку / Показати по ширині / Збільшити по надрукованому тексту
	Open Template Window	Відкрити вікно шаблонів
	Generate Name for Structure	Згенерувати назву сполуки
	3D Viewer	Відображення в 3D форматі
	Select/Move Select/Rotate 3D Rotation	Виділити/Перемістити Виділити/Повернути 3D обертання
	Lasso On/Of	Виділення (ласо)
	Draw Normal, Draw Continuous, Draw Chains	Малювання в'язків в нормальному режимі Малювання в'язків (продовження) Малювання ланцюга
	Up Stereo Bonds, Down Stereo Bonds, Coordinating Bonds	Наближений стерео-зв'язок, Віддалений стерео-зв'язок, Координаційний зв'язок
	Solid Delocalization Curve, Markush Bond	Делокалізовані зв'язки, Структури Маркуша
	Reaction Plus	Реакційний плюс

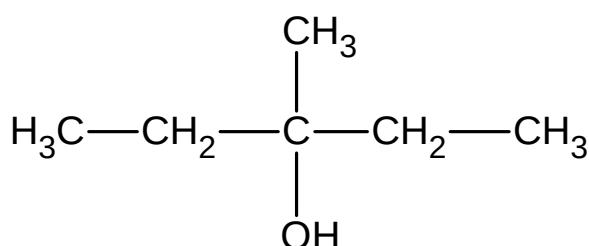
	Reaction Arrow / Labeling	Реакційна стрілка та позначення умов реакції
	Brackets Tool	Написання формул полімерів
	Change Position	Зміна позиції атомів $\begin{array}{ccc} \text{CH}_3\text{---CH}_3 & & \text{H}_3\text{C---CH}_3 \\ & & \text{C---CH}_3 \\ & & \text{H}_3 \end{array}$
	Set Bond Horizontally / Vertically	Розміщення в'язків горизонтально / вертикально
	Flip on Bond / Flip Top to Bottom / Flip Left to Right	Обертати навколо зв'язку. Обертати зверху донизу. Обертати справа вліво.
	Instant Template	Створити шаблон молекули
	Clean Structure	Раціоналізація структури
	3D optimization	3D оптимізація
	Manual Numbering	Ручна нумерація
	Edit Label	Змінити групу атомів на інший замісник
	Text	Додавання тексту

2. Налаштування роботи програми в режимі Structure

Зображення формул органічних речовин можуть бути в скелетній формі:



Та напівструктурній формі:



Для налаштування використовується інструмент **Structure Properties** в меню **Tools**:

Показати всі
атоми Карбону

Застосувати

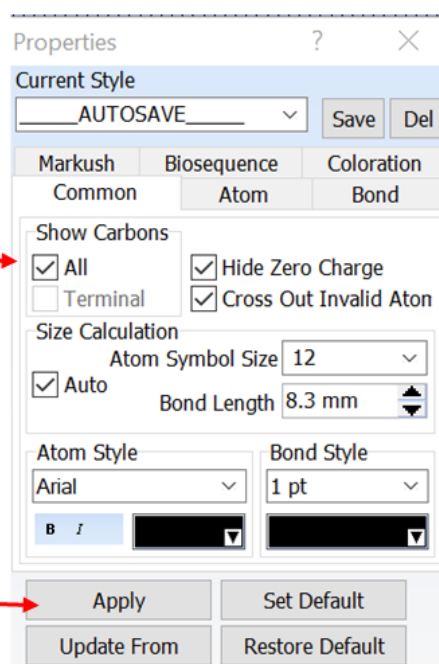


Рис. 2.1 – Налаштування типу структурних формул

3. Складання структурних формул аліфатичних вуглеводнів

Редактор структурних формул ChemSketch має декілька функцій, за допомогою яких можна легко та естетично побудувати формули

вуглеводнів – алканів, алкенів, алкінів, дієнів, циклоалканів та їх галогенпохідних. Розглянемо ці способи.

3.1. Побудова структурних формул алканів

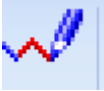
Перший спосіб. В режимі **Structure** натиснути на символ Карбону на панелі ліворуч. Натиснути лівою клавішею мишки на поле редактору - з'явиться формула метану. Натискуючи лівою кнопкою мишки на формули метану, відтягнути зв'язок в необхідний бік. З'явиться формула етану. Такі послідовні дії дають можливість утворити ланцюг будь-якої довжини.

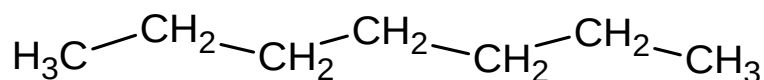
Недоліком цього методу є неоднакова довжина карбон-карбонового зв'язку, яку можна виправити виділивши певний фрагмент молекули за

допомогою інструменту  **Lasso** і змінювати положення фрагмента

молекули клавішами комп'ютера -  .

Другий спосіб. Для побудови зигзагоподібного карбонового ланцюга

необхідно натиснути на інструмент  **Draw Chains**. Натиснути та затримувати ліву клавішу мишки. На екрані з'явиться позначення кількості атомів Карбону в ланцюгу, наприклад C₇. При відпусканні кнопки мишки, утвориться формула вуглеводню із зигзагоподібним скелетом:



Якщо необхідно відобразити таку формулу в лінійній формі, то слід виконати всі ці операції натиснувши й утримуючи клавішу  на комп'ютері. Утвориться лінійна формула:



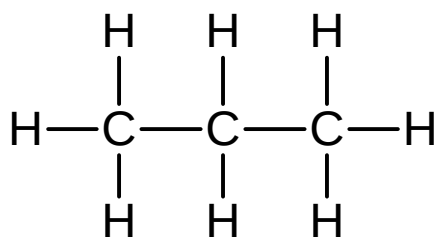
Перевагою цього методу є те, що довжина карбон-карбонових ланцюгів буде однаковою. Якщо виникає необхідність відобразити

розгорнуту структурну формулу, зі зв'язками між всіма атомами Карбону

і Гідрогену, користуються інструментом

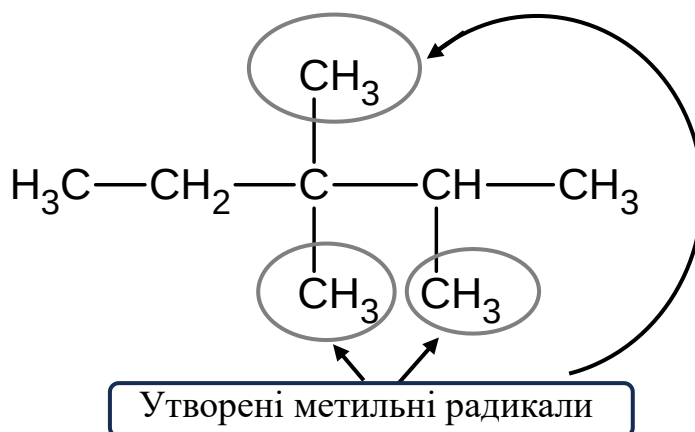


3D Optimization:



Також можна показати всі атоми Гідрогену, якщо скористуватись командами: **Tools ► Add Explicit Hydrogens**. При цьому методі розташування атомів Карбону буде незмінним.

Для того, щоб додати в ланцюгу метильні радикали треба на лівій панелі обрати й натиснути на символ атома Карбону. При натисканні на будь-який фрагмент ланцюга будуть з'являтися метильні радикали.



Для того, щоб перетворити метильний радикал на будь-який інший гетероатом, необхідно його обрати на лівій панелі, і кліком на відповідний радикал перетворити його, наприклад, на галогеналкан.

Для заміни метильного радикала на етильний (або іншу групу)



користуються інструментом

Edit Label. Необхідно натиснути на цей інструмент, і метильний радикал, який необхідно замінити на етильний (або інший замісник). З'являється вікно:

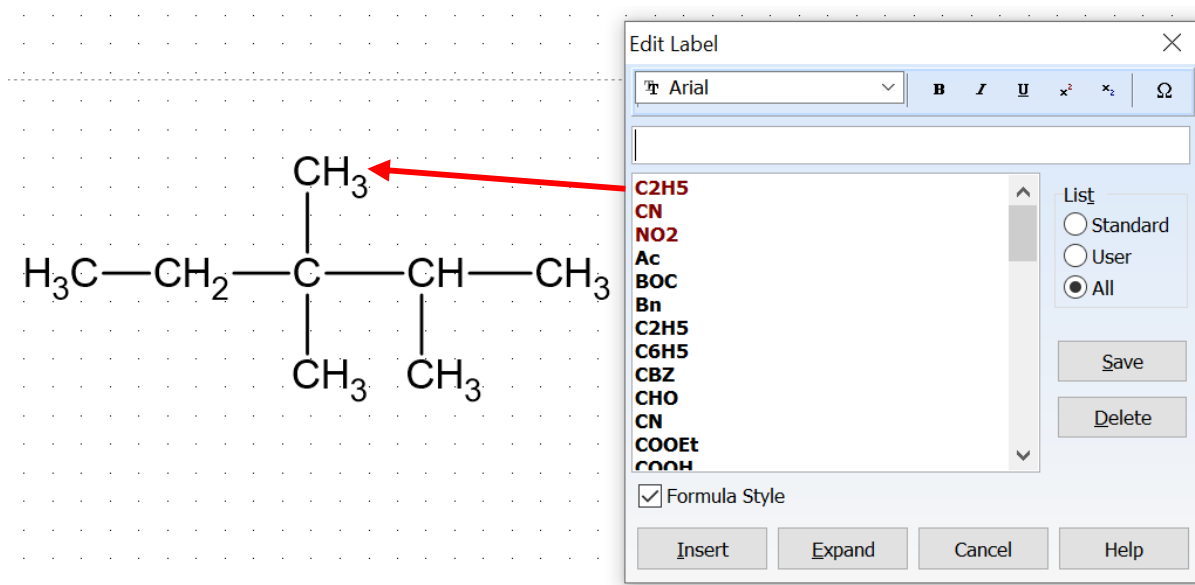


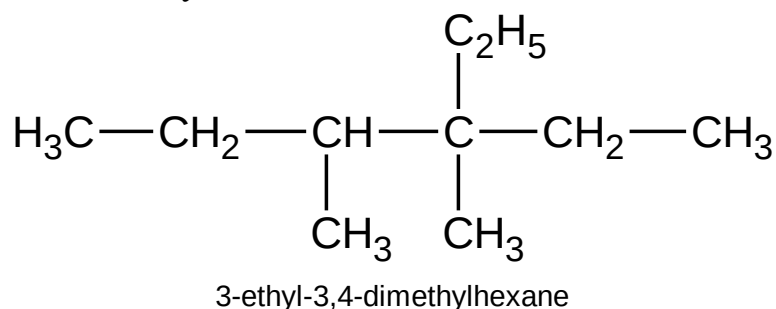
Рис. 3.1 – Інструмент **Edit Label**

Обравши відповідний замісник, необхідно натиснути **Insert** і замісник буде замінено на інший. При необхідності можна власноруч у вікні прописати необхідний замісник.

Для того, щоб редактор дав **назву речовині** за міжнародною

номенклатурою IUPAC треба натиснути на інструмент  **Generate Name for Structure**.

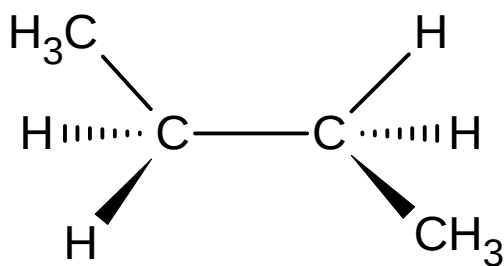
Утворюється назва сполуки:



Для побудови стерео зображень можна перетворити зв'язки на

клиновидний зв'язок, попередньо обравши інструменти:  **Stereo Bonds**, або

Down Stereo Bonds:

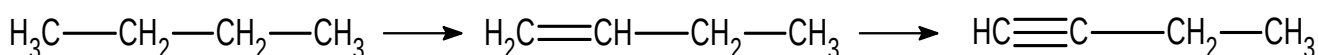


3.2. Побудова структурних формул вуглеводнів із кратними зв'язками

Для побудови структурних формул алкенів, алкінів, дієнів використовують такі самі операції, що і для побудови формул алканів. Для утворення подвійних та потрійних зв'язків необхідно клікнути на зв'язок лівою кнопкою миші. Якщо клікнути один раз – зв'язок буде подвійний, два рази – потрійний.



При цьому повинен бути виділений інструмент: **Draw/Normal.**



3.3. Побудова структурних формул циклоалканів

Для побудови структурних формул циклоалканів можна скористуватись таким способом:

Побудувати ланцюг із певною кількістю атомів Карбону, як для алкану. Натиснути на перший атом Карбону лівою кнопкою мишки та перетягнути зв'язок до останнього атому Карбону. Для надання структурі



симетричного та естетичного вигляду натиснути інструмент:

Clean Structure. Радикали та інші замісники добудовуються аналогічно алканам. Зручно скористуватись вікном шаблонів, що розташовані ліворуч на панелі.

4. Нумерація атомів Карбону в ланцюгах

Для нумерації атомів Карбону користуються інструментом **Manual Numbering**. Для цього відкривши відповідне вікно слід обрати формат нумерації (**Number Format**). Це можуть бути цифри, або букви. Це обирається за допомогою колонки **Number** у вікні. Після цього треба натиснути OK у вікні. Далі – натискаючи по черзі на відповідні атоми Карбону з’являється їх нумерація. Зазвичай вона – кольорова, колір якої можна змінювати власноруч натиснувши у верхній панелі інструментів **Options ► Preferences ► Structure ► Auto / Manual Numbering Color**. Можна обрати в палітрі необхідний колір і натиснути **OK**.

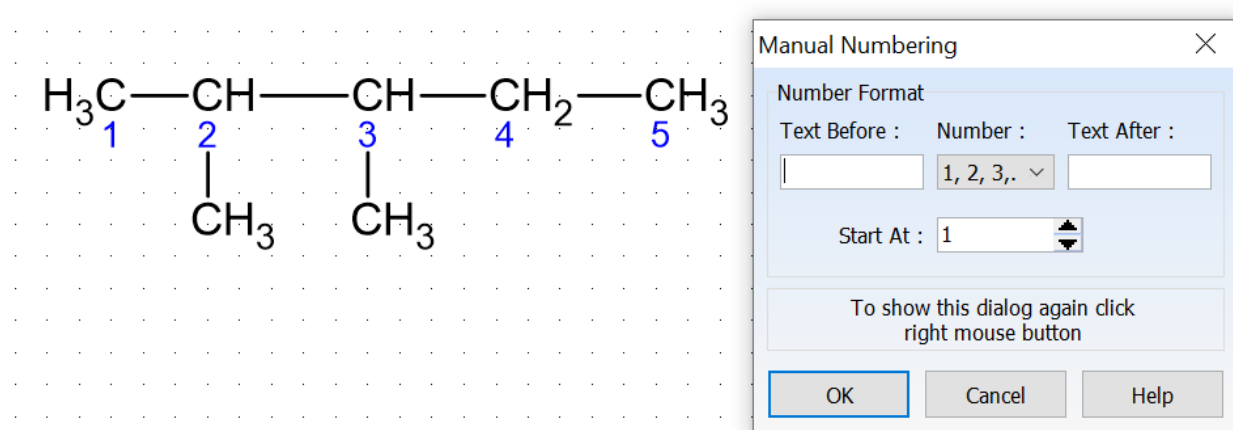


Рис. 4.1 – Інструмент нумерації атомів

Якщо необхідно розташувати нумерацію атомів над символами елементів, слід провести таке налаштування: **Tools ► Structure Properties ► Atom ► Numbering ►** На вісі Y вказати **-5 ► Set Default**

Properties ? X

Current Style

AUTOSAVE Save Del

Markush Biosequence Coloration

Common Atom Bond

Arial 11

B I

X 0 mm Center

Y -5 mm Chow

C H n q v I N A Numbering

Apply Set Default

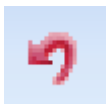
Update From Restore Default

Вісь розташування нумерації

Вибрати за замовчуванням

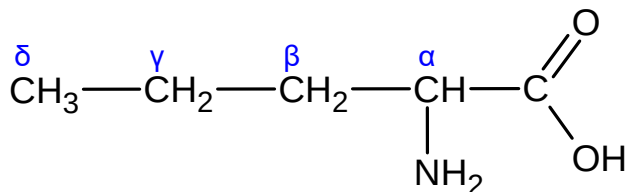
Рис. 4.2 – Налаштування розташування нумерації атомів

При необхідності нумерацію можна поступово видаляти за допомогою



клавіші **Undo Move**.

При складанні формул амінокислот за допомогою грецького алфавіту. Для цього у вікні **Manual Numbering** в колонці **Manual Numbering** обирають відповідну нумерацію. При натисканні на атом Карбону ланцюга з'являється літера грецького алфавіту:



Збереження побудованих формул

Для того, щоб вставити готову формулу, або рівняння у документ необхідно його виділити за допомогою  Lasso, натиснути **Ctrl + C**. Далі вставити його у документ Word, натиснувши **Ctrl + V**.

Також можна зберігати готову формулу у папках комп'ютера в форматі ***PNG**, для того, щоб перенести формулу на платформах тестування – у форматі ***GIF**.

5. Складання структурних формул аренів

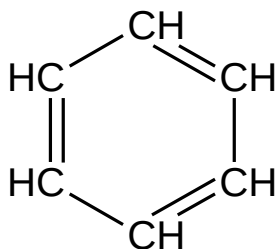
Формули аренів можна відображати різними способами.

Перший спосіб

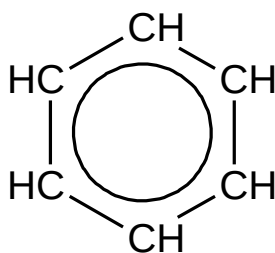
Для складання формул можна скористуватись шаблоном на полі Редактору праворуч:



При обиранні цієї структури й натисканні на робочий стіл з'являється формула Кекуле:



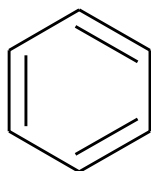
Для відображення делокалізованих зв'язків користуються командою: **Tools ► Show Aromaticity** (показати ароматику), а щоб повернутися назад використовують програму **Hide Aromaticity**.



Другий спосіб

Для відображення скорочених структурних формул слід перейти до режиму **Draw**. Відкрити вікно шаблонів **Templates ► Template Window ► Aromatics**.

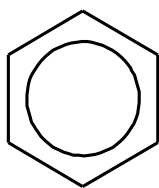
Обрати в режимі Draw формулу бензену, скопіювати її та вставити на робочий стіл Редактора.



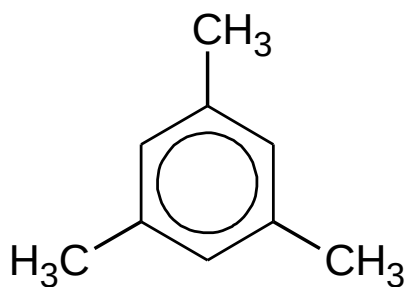
Перехід до формули з делокалізованими зв'язками користуються командою

Tools ► Show Aromaticity (показати ароматику).

Утворена структурна формула має такий вигляд:

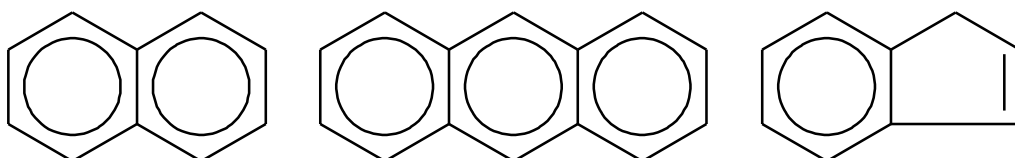


Для утворення структурних формул гомологів бензену, що утворені на основі побудованого бензольного кільця, треба до нього додати відповідні радикали, або характеристичні групи:



Щоб в замісниках відображались атоми Карбону і Гідрогену, слід виділити цей замісник інструментом **Lasso**, і за допомогою інструменту **Structure Properties** в меню **Tools** натиснути **Apply**.

Таким чином, за допомогою вікна шаблонів вікно шаблонів **Templates** можна побудувати структурні формули інших представників ароматичних вуглеводнів:

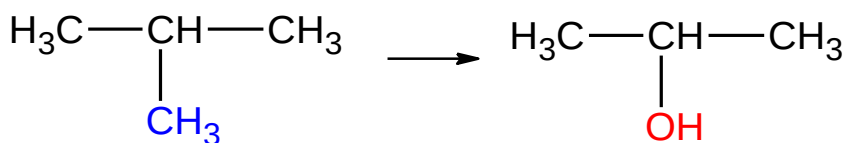


Для генерування назви користуються інструментом **Generate Name for Structure**.

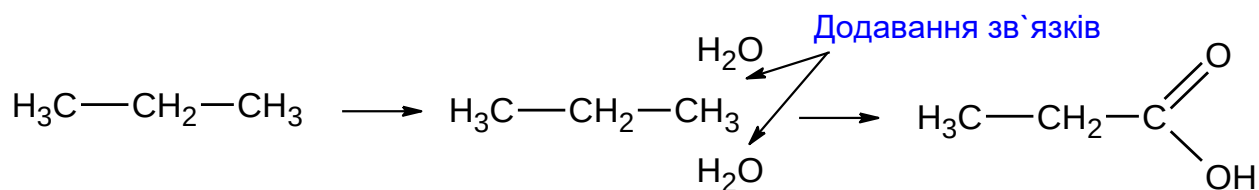
6. Складання структурних формул сполук з функціональними групами

Редактор структурних формул ChemSketch дає можливість вбудовувати в молекулу характеристичні (функціональні) групи – гідроксильну, альдегідну, карбонільну, аміно – , нітро – та інші.

Для складання формул спиртів зручно побудувати молекулу алкану із вуглеводневим радикалом. За допомогою панелі атомів, що розташовані ліворуч, обирають атом Оксигену. Натиснувши на відповідний радикал, відбудеться його заміна на гідроксильну групу.

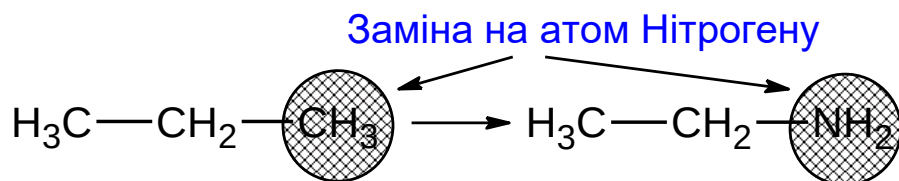


Для створення альдегідної, або карбоксильної груп можна їх створити власноруч, поетапно, користуючись панеллю атомів та хімічних зв'язків:



Також можна скористуватись вікном шаблонів, що розташовані праворуч, обравши відповідну характеристичну групу.

Для утворення формул амінів зручно перетворити формулу алкану на амін, обравши на панелі ліворуч атом Нітрогену, і натиснути на відповідний фрагмент молекули:



Для утворення формул нітросполук, нітрилів та інших необхідно



натиснути на інструмент **Edit Label** і обрати відповідну групу, замінити на неї певний фрагмент структури:

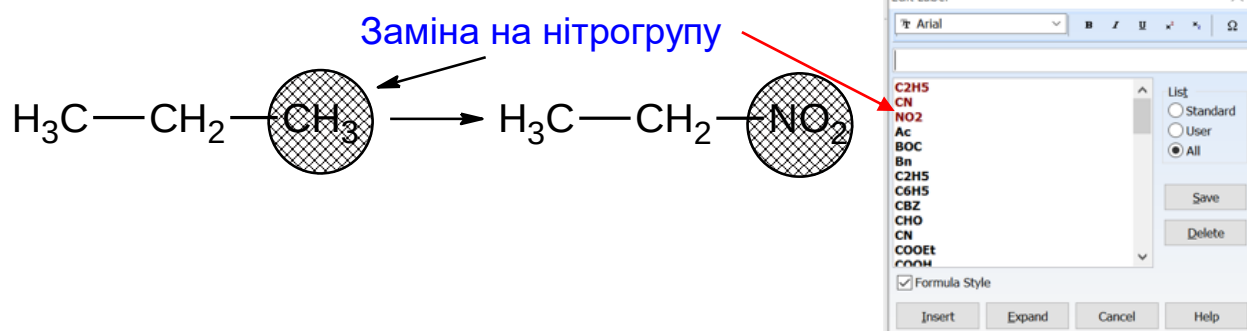


Рис. 6.1 – Заміна метильного радикалу на нітрогрупу

Аналогічно створюються структурні групи та інших сполук з функціональними групами.

7. Складання формул полімерів

Розглянемо методи складання структурних формул полімерів на прикладі поліетилену.

На першому етапі ми складаємо структурну формулу етану. Оскільки у формулі поліетилену немає подвійних зв'язків, ми скористуємось саме формулою етану. Для того, щоб показати фрагмент хімічного зв'язку, на лівій панелі обираємо атом Гідрогену, і натискаючи на метильний радикал лівою кнопкою миші, відтягуємо його у бік. Так саме робимо і з другим метильним радикалом ①. Для того, щоб видалити атоми Гідрогену і залишити фрагмент зв'язку, на лівій панелі обираємо інструмент  → . При натисканні на атоми Гідрогену вони зникають, залишаючи зв'язки ②. Щоб взяти фрагмент елементарного ланцюга у дужки та вказати ступінь полімеризації, користуються інструментом  **Brackets Tool** ③. У вікні обираємо тип дужок, та ступінь полімеризації:

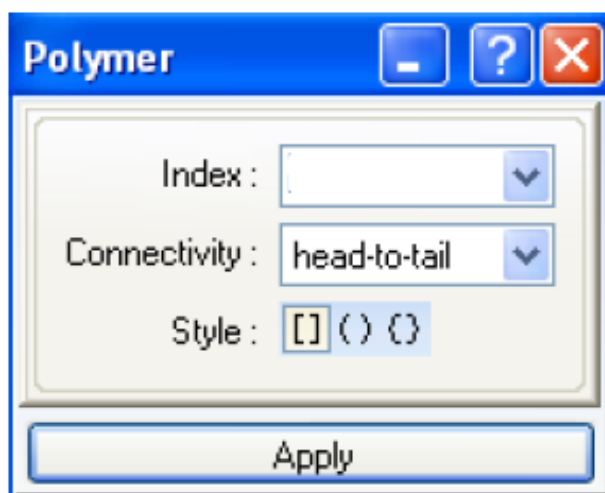
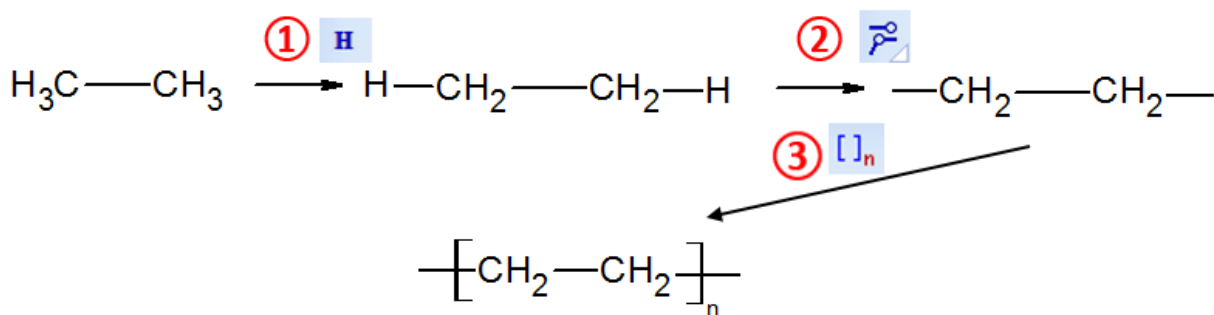


Рис. 7.1 – Налаштування інструменту Brackets Tool

При ручному розташуванні дужок утворюється молекула полімеру:



Аналогічно можна побудувати та більш складні молекули полімерів, та хімічні реакції їх утворення.

8. Робота із шаблонами

Редактор ChemSketch містить значний набір шаблонів структурних формул, рисунків та символів. Для того, щоб відобразити структурну формулу складної молекули, користуючись вікном шаблонів необхідно скористуватись верхньою вкладкою **Templates** ► **Template Window** (Вікно шаблонів). Також можна скористуватись клавішею **F5**. За допомогою панелі можна обрати тип сполуки, або рисунку.

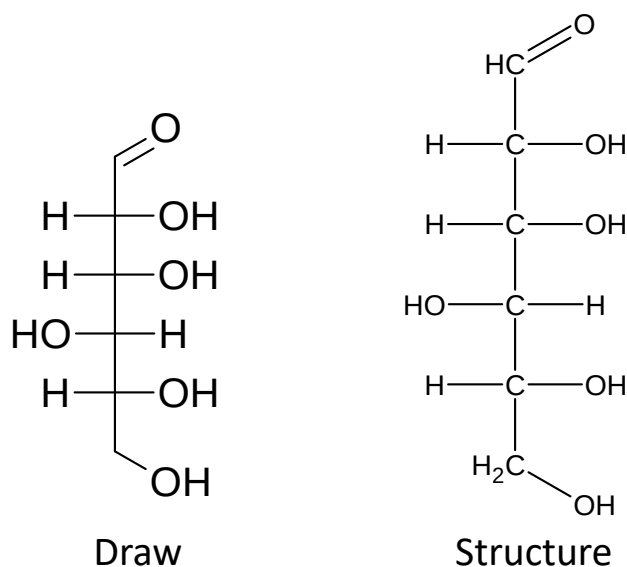
Тип даних

Сторінка

The screenshot shows the 'Template Window' in ChemSketch. The 'Structure' tab is active, and the 'Aromatics' category is selected. The '1(5) Aromatic fused' sub-category is chosen. The window displays a grid of aromatic fused systems, including Benzene, Pentalene, Indene, Naphthalene, Azulene, as-Indacene, s-Indacene, Biphenylene, Acenaphthylene, Fluorene, Phenalene, Heptalene, Phenanthrene, Anthracene, Fluoranthene, Acephenanthrylene, Aceanthrylene, Triphenylene, Pyrene, Chrysene, Naphthacene, Picene, Perylene, and Coronene. A left sidebar lists various chemical categories like Alkaloids, Amino Acids, Anions, Aromatics, Arrows, Bicyclics, Carbohydrates, Chains, DNA/RNA Kit, Graphical Labels, HPLC, Lab Animals, Lab Kit, Labels, Lattice, Lewis Structures, Monocyclic Alkanes, N-Rings, Rings, Sugars: alfa-D-Fur, and Sugars: alfa-D-Pyr.

Рис. 8.1 – Вікно шаблонів **Template Window**

При копіюванні молекули в режимі **Structure** буде застосовуватись стиль, що налаштований у вихідному документі, а в режимі **Draw**, буде залишатись такий вигляд формули, як зазначено в шаблоні. Наприклад:



У вікні шаблонів є набір хімічного посуду, обладнання, кристалічних ґраток, структур Льюїса, орбіталей та іншого (Рис. 8.2).

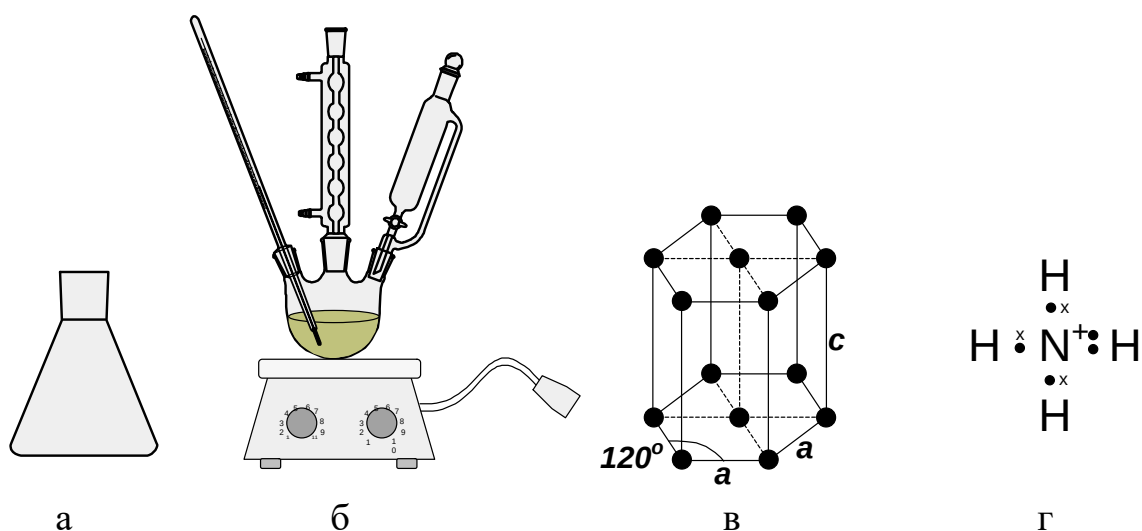


Рис. 8.2 – Рисунки посуду (а), обладнання (б), кристалічних ґраток (в) та структур Льюїса (г)

Користуючись набором рисунків посуду та обладнання можна складати різні хімічні установки.

9. Складання хімічних рівнянь в редакторі ChemSketch

Для складання хімічних рівнянь виникає потреба ставити знак «+» між реагентами. Для цього можна скористатися інструментом  **Reaction Plus**. Для налаштування його розміру користуються інструментом налаштування: **Option ► Preferences ► Reaction**:



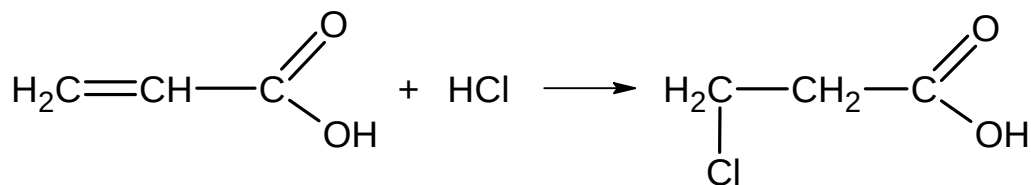
Рис. 9.1 – Панель **Preferences**, вкладка **Reaction**

Для налаштування вигляду реакційних стрілок користуються групою **Arrow ► Reaction Arrow**.

Розглянемо два способи написання хімічних рівнянь.

Перший спосіб. Записуємо формули реагентів, сполучивши їх символом «+», використавши інструмент **Reaction Plus**. Ставлять реакційну стрілку

За допомогою інструменту  **Reaction Arrow**. Наприклад:



Якщо необхідно вказати умови реакції, або записати реагенти над реакційною стрілкою, а продукти під нею, слід скористуватись

інструментом  **Reaction Arrow Labeling**. Для цього спочатку будують звичайну реакційну стрілку за допомогою інструменту **Reaction Arrow** натискають на неї, після чого з'являється вікно **Edit Reaction Conditions**:

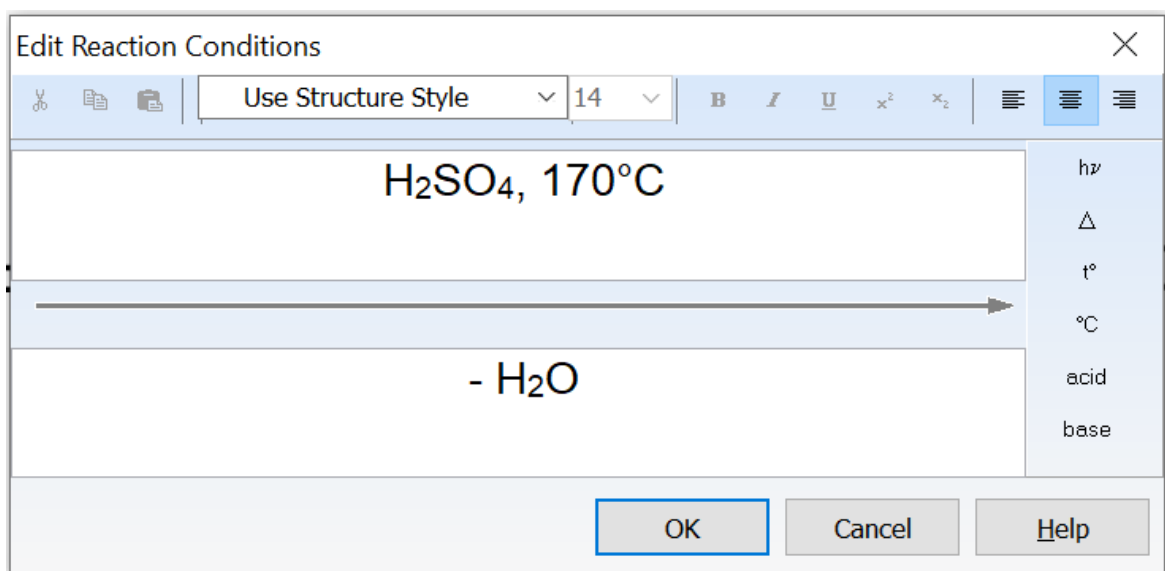
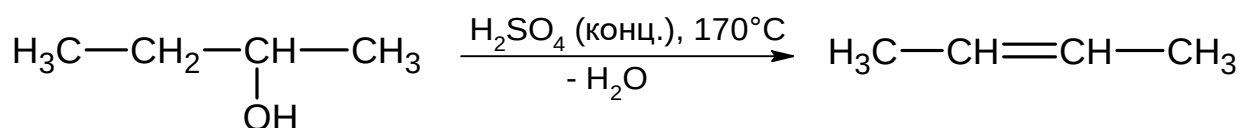


Рис. 9.2 – Вікно **Edit Reaction Conditions**

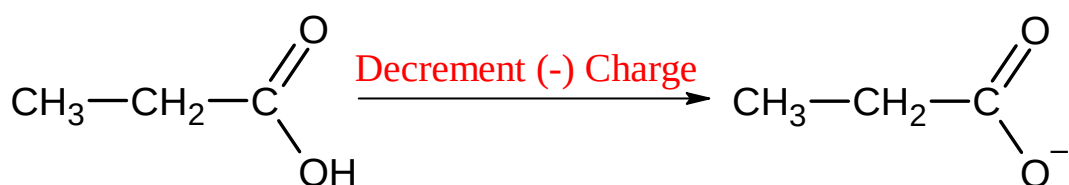
В цьому вікні над стрілкою можна прописати формулу реагентів, температуру, інші умови. Під стрілкою можна написати формулу побічного продукту реакції. Наприклад:



10. Написання формул йонів та радикалів

Для написання формул йонів застосовується інструмент 

Increment (+) Charge та  **Decrement (-) Charge**. Також в цьому інструменті знаходяться кнопки радикалів. При натисканні на відповідний фрагмент молекули він перетворюється на йон, або радикал:



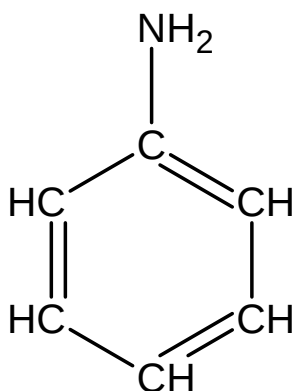
Слід зазначити, що програма враховує валентність, і автоматично прибирає зайві атоми Карбону.

11. Моделювання 3D структур

3D моделювання знадобиться освітянам для створення презентацій, методичних розробок, та для візуалізації навчального матеріалу. Після створення моделі молекули в редакторі структурних формул слід



скористуватись інструментом **3D - Viwer**. Розглянемо 3D – моделювання для аніліну. Створимо його молекулу в редакторі:



При на тисканні на інструмент **3D – Viwer** з'являються 3D моделі аніліну:

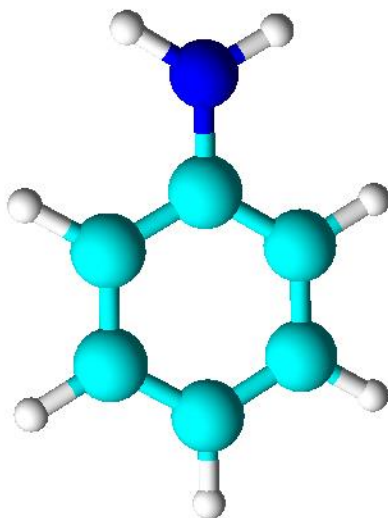
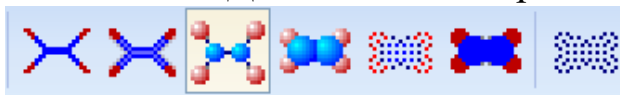


Рис. 11.1 – 3D модель молекули аніліну

Для оптимізації та відображення атомів Гідрогену, користуються інструментом  3D Optimization. Для зміни кольору фону застосовують інструмент **Options ► Colors**. Для зміни відображення

моделей користуються кнопками:



При цьому змінюється відображення молекули:

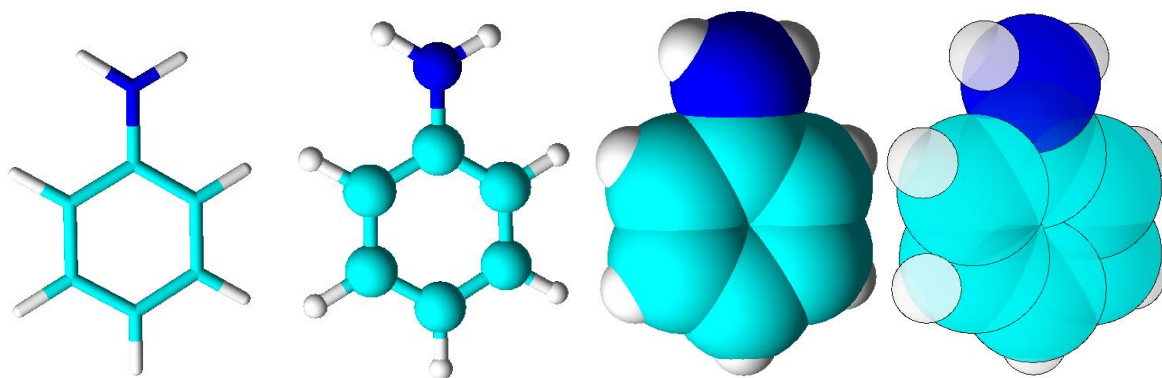


Рис. 11.2 – Різні 3D відображення молекули аніліну

Для обертання молекули існують два режими: ручний та автоматичний. Для застосування ручного режиму користуються інструментом



. Для автоматичного режиму – інструментом



. Для збереження рисунка можна скористуватись комбінацією клавіш **Ctrl + C**.

12. Розрахунок відносної молекулярної маси та масової частки елементів в речовині

Для створеної структурної формули в редакторі розраховується відносна молекулярна маса цієї речовини. Вона відображається в нижній панелі редактору формул. Ліворуч буде розташована молекулярна формула речовини.

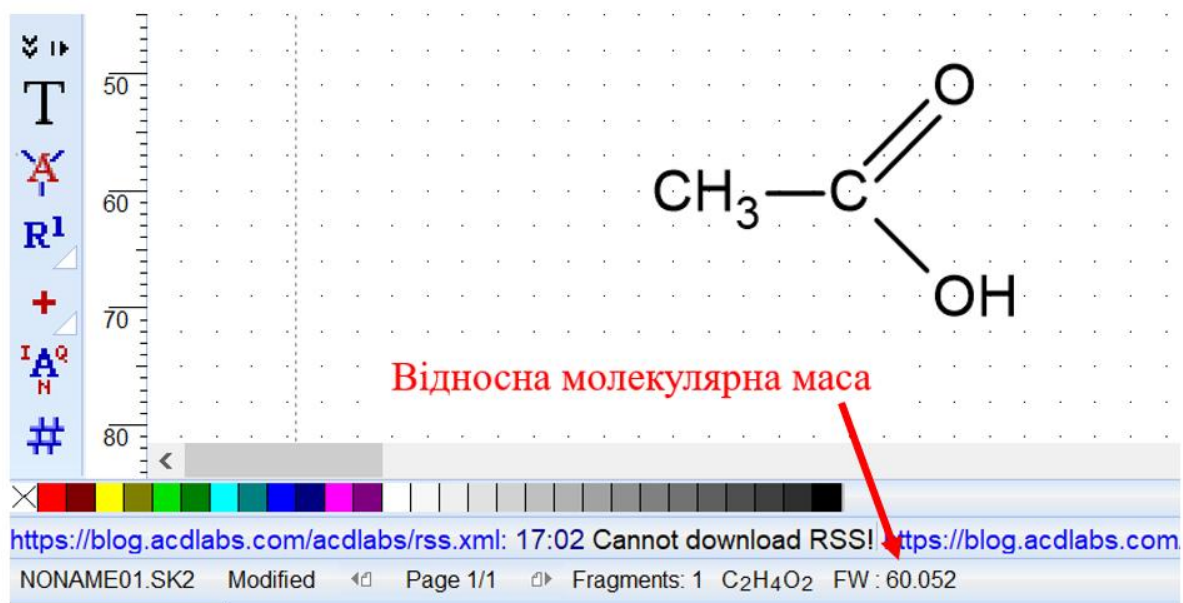


Рис. 12.1 – Відносна молекулярна маса речовини

Програма дає можливість розраховувати молярну масу фрагмента молекули. Для цього за допомогою інструменту **Lasso** необхідно виділити фрагмент молекули, в нижній панелі буде відображатись відносна молекулярна маса фрагмента, що виділений.

Для розрахунку масової частки елементів, що входять до складу речовини слід скористуватись інструментами: **Tools** ► **Calculate** ► **Composition**

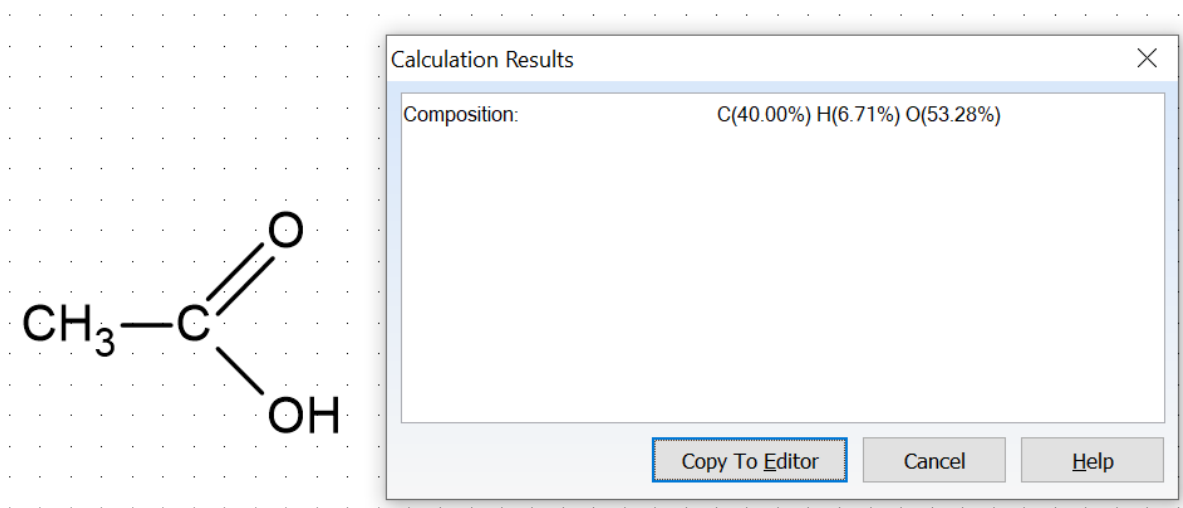
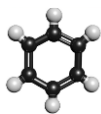


Рис. 12.2 – Розрахунок масової частки елементів в речовині

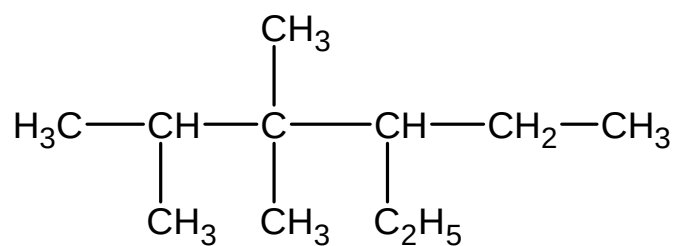
Функція **Calculate** дає можливість розраховувати й інші фізичні показники речовини.



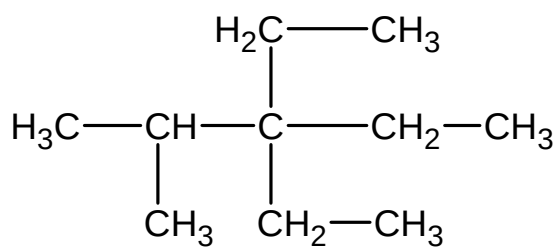
Завдання для самоконтролю

1. Користуючись редактором формул ChemSketch побудуйте такі молекули:

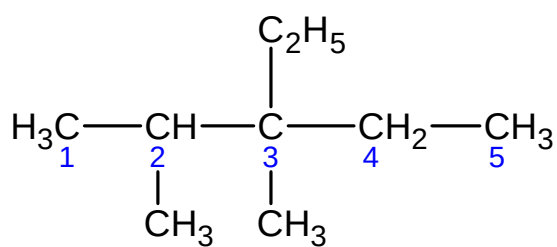
1.1.



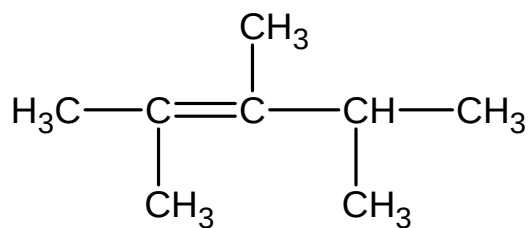
1.2.



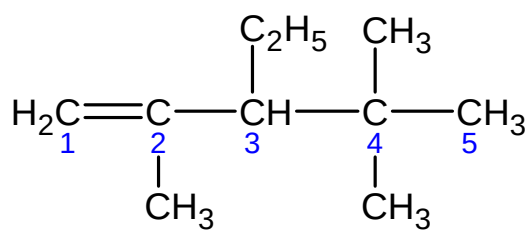
1.3.



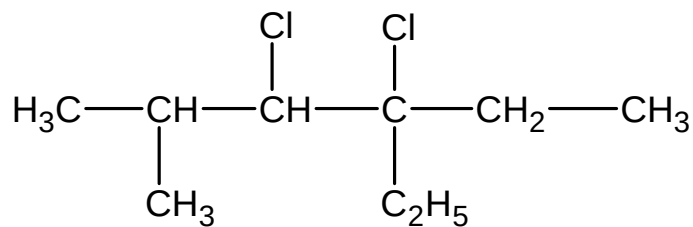
1.4.



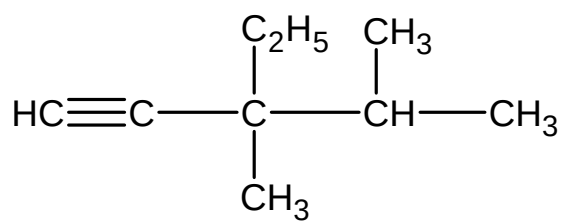
1.5.



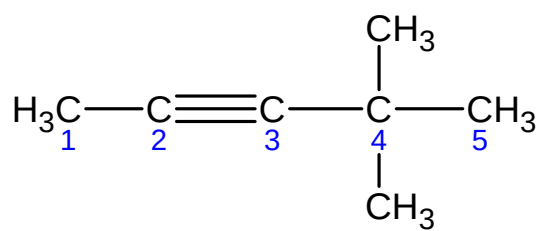
1.6.



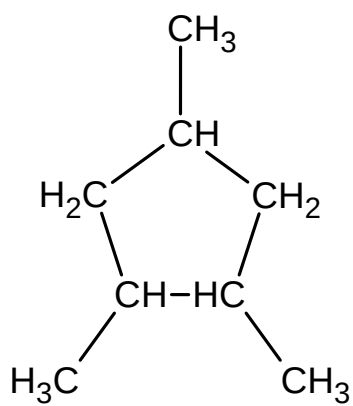
1.7.



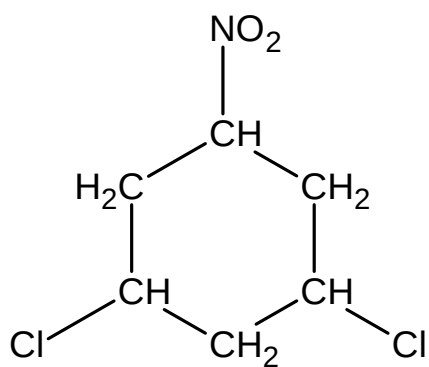
1.8.



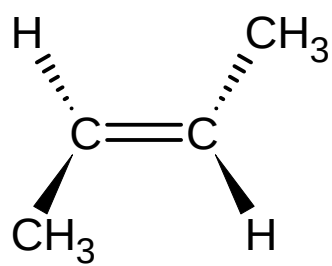
1.9.



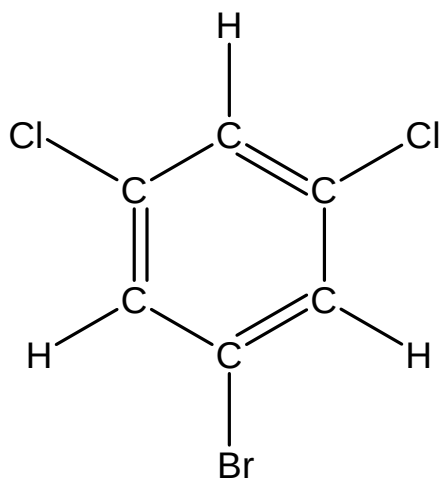
1.10.



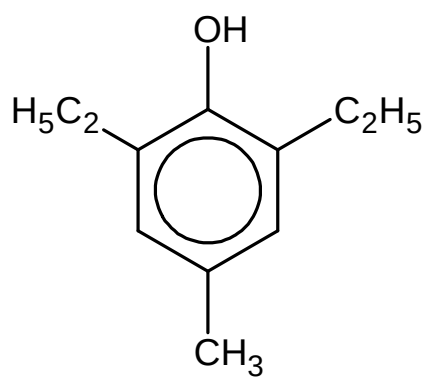
1.11.



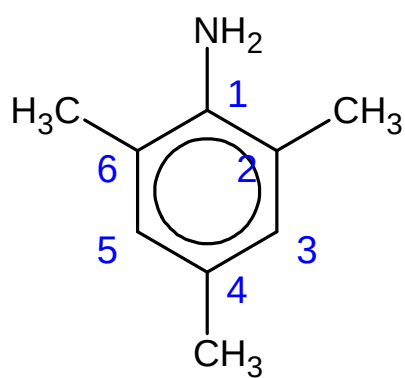
1.12.



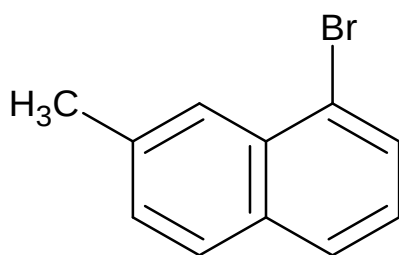
1.13.



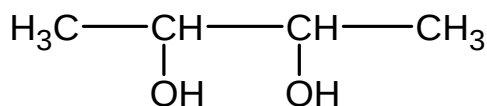
1.14.



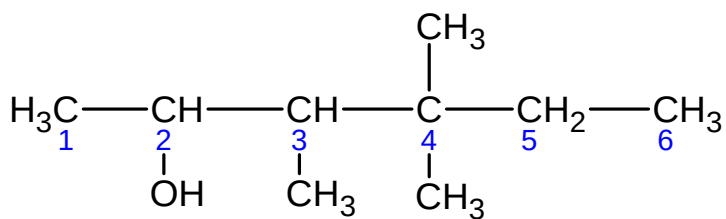
1.15.



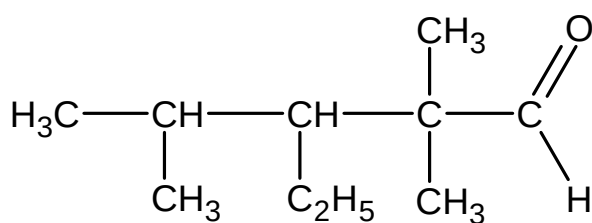
1.16.



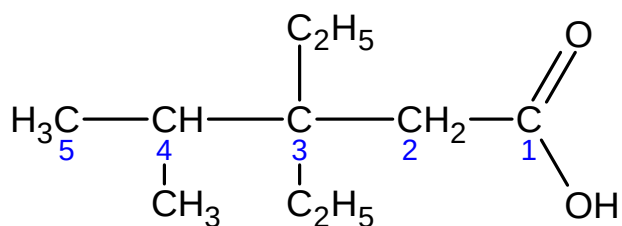
1.17.



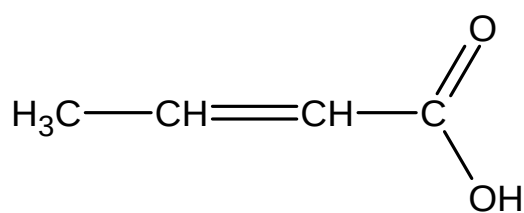
1.18.



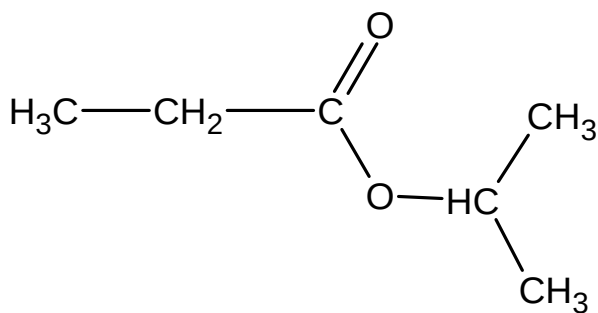
1.19.



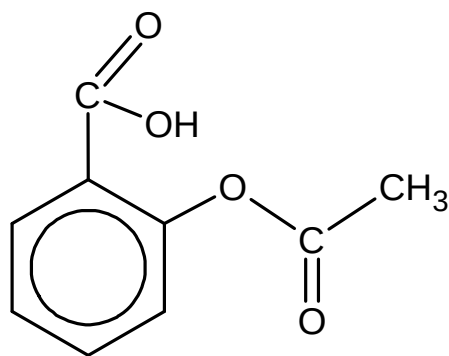
1.20.



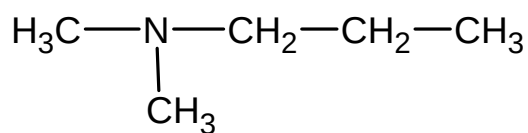
2.21.



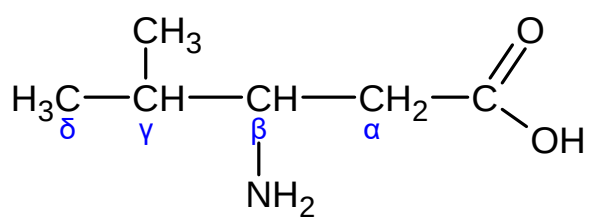
1.22.



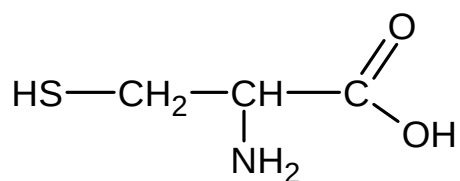
1.23.



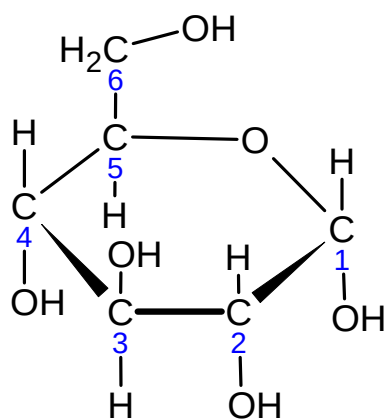
1.24.



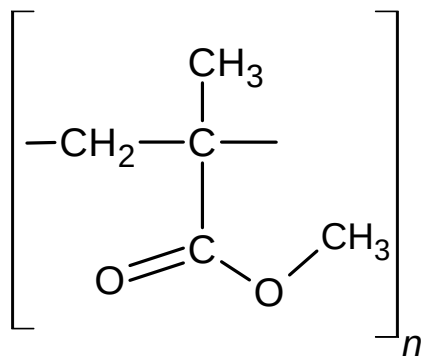
1.25.



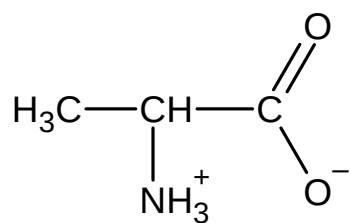
1.26.



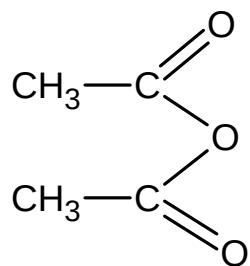
1.27.



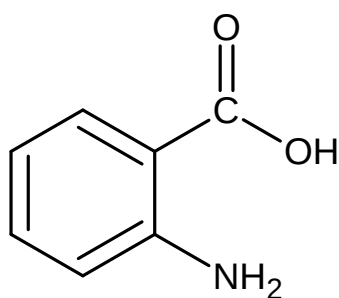
1.28.



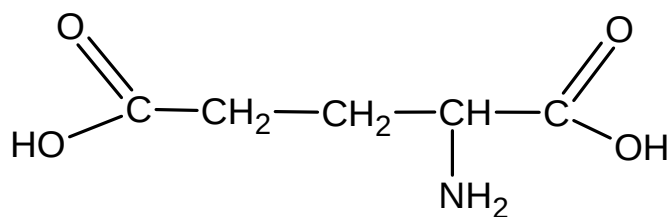
1.29.



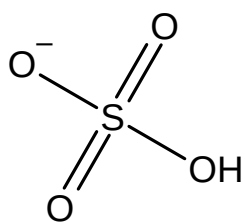
1.30.



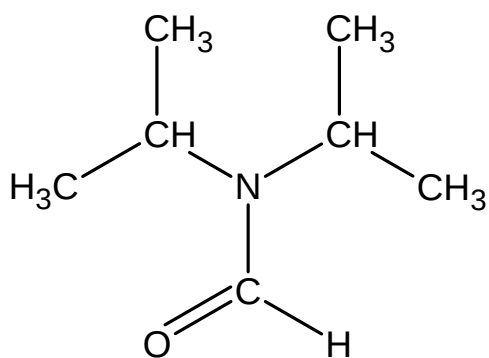
1.31.



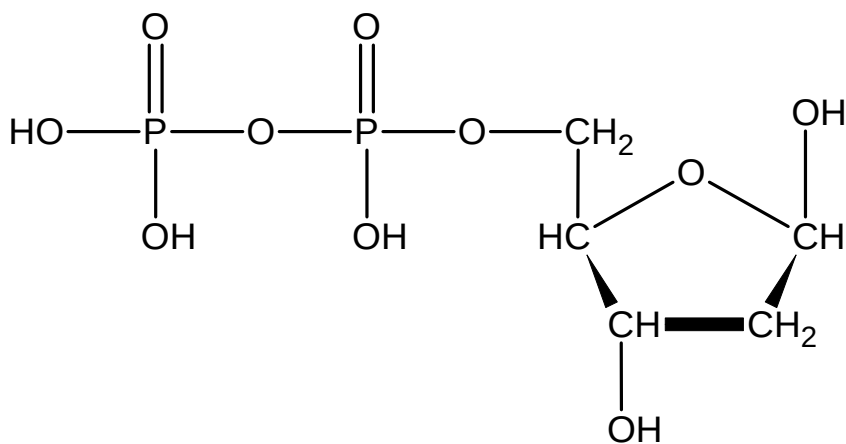
1.32.



1.33.

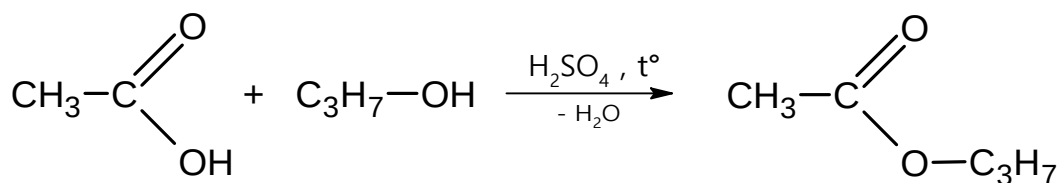


1.34.

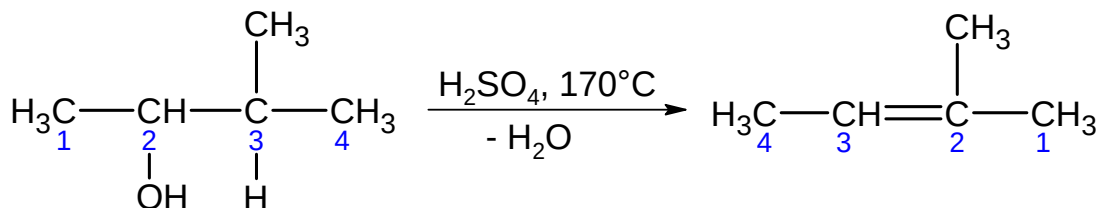


2. Користуючись редактором формул ChemSketch напишіть рівняння хімічних реакцій:

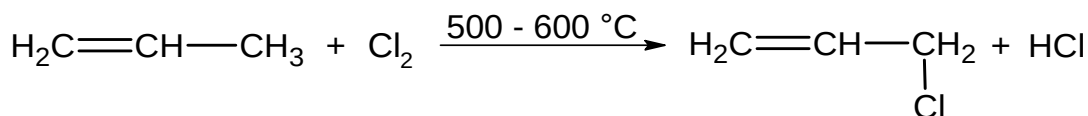
2.1.



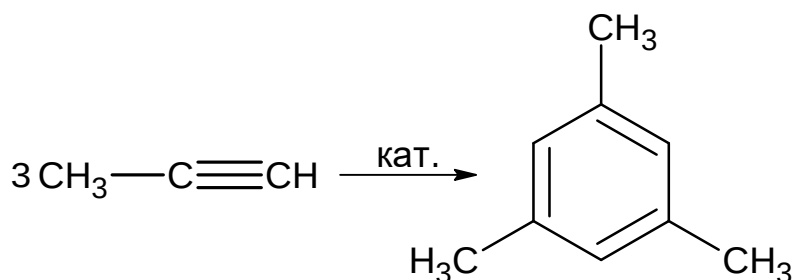
2.2.



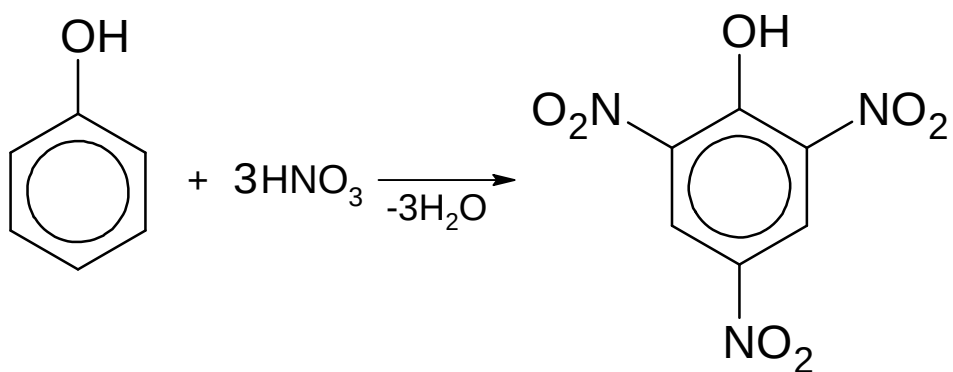
2.3.



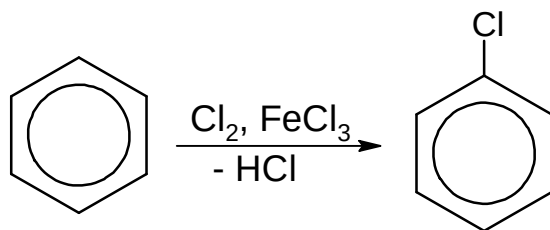
2.4.



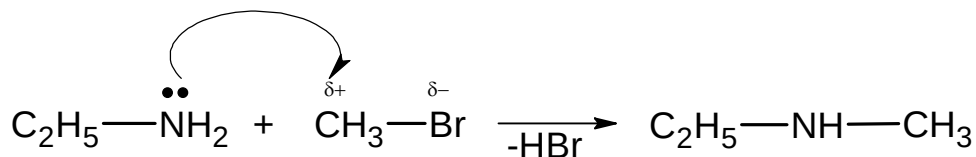
2.5.



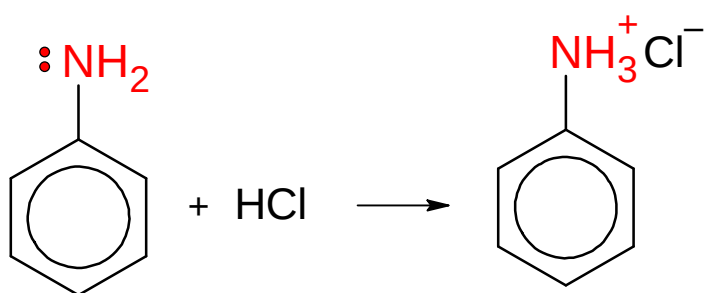
2.6.



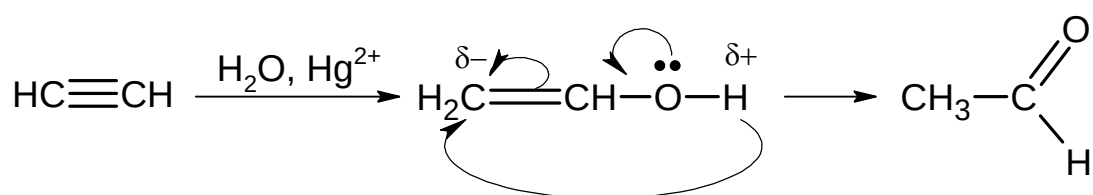
2.7.



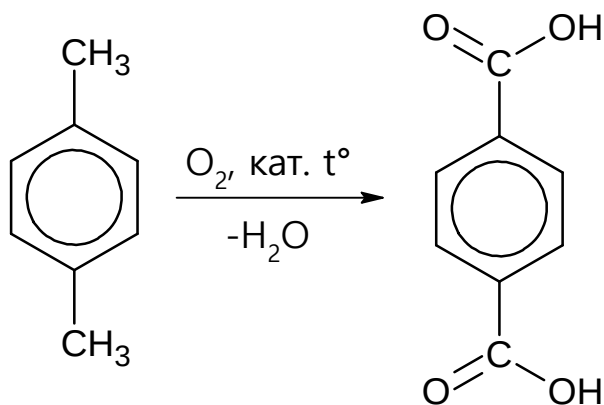
2.8.



2.9.

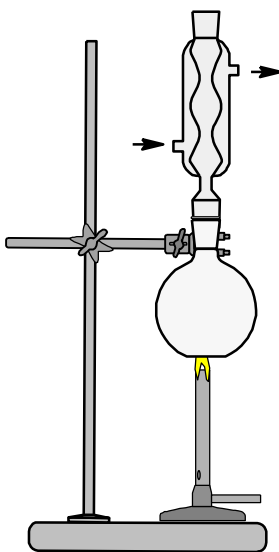


2.10.

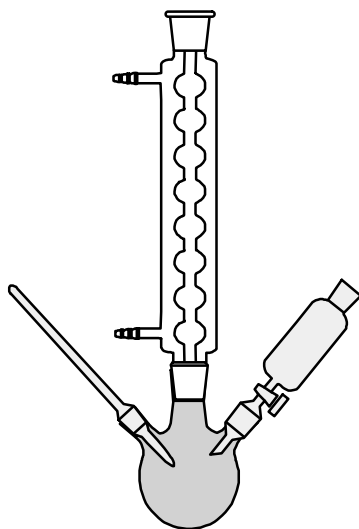


3. Користуючись редактором формул ChemSketch зробіть рисунки:

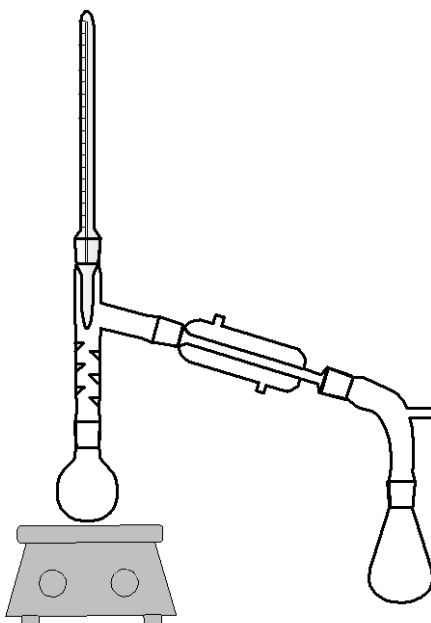
3.1.



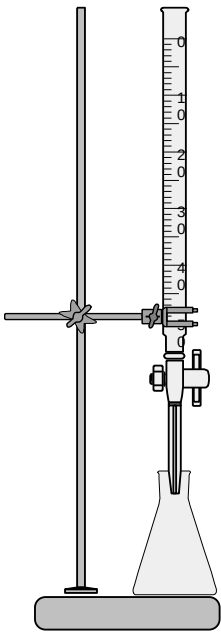
3.2



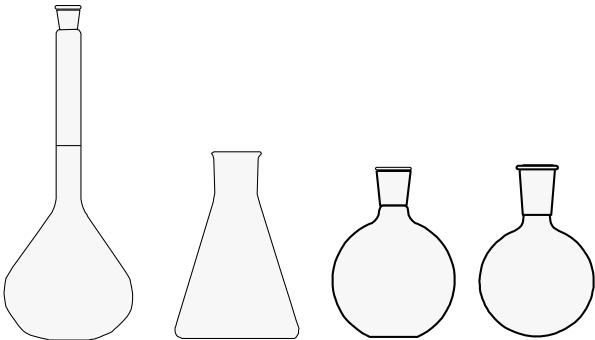
3.3.



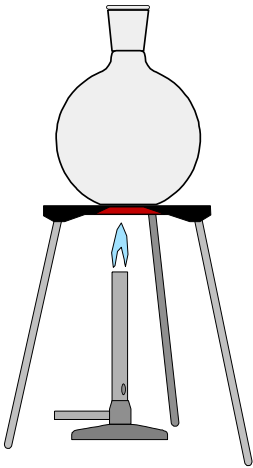
3.4.



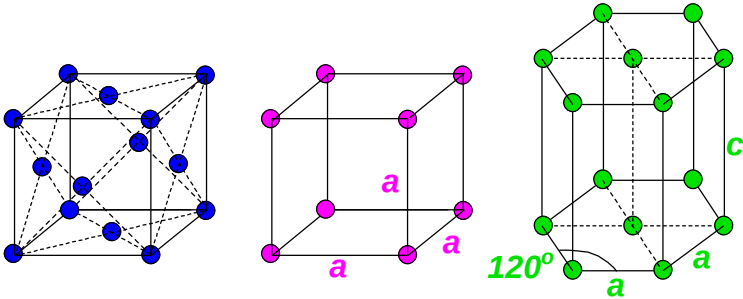
3.5.



3.6.



3.7.





ЛІТЕРАТУРА

1. Мідак Л. Я., Кузишин О. В., Пахомов Ю. Д. Методичні вказівки до лабораторних робіт з курсу «Сучасні інформаційні технології (за професійним спрямуванням). Програмний пакет ACD/Labs». Івано-Франківськ : ПП Голіней О.М., 2016. 80 с.
2. Комп'ютерні та інформаційні технології в хімії : стислий конспект лекцій для студентів спеціальності 102 «Хімія» денної форми навчання; уклад. С. О. Коновалова. Краматорськ : ДДМА, 2020. 80 с.
3. 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 [Електронний ресурс] : навч. посіб. / за ред. Колісника С. В., Панайотової Т. Д. ; МОН України. Харк. нац. пед. ун-т імені Г. С. Сковороди. Харків : ХНПУ, 2018. 92 с.
4. ACD/ChemSketch Version 12.0 for Microsoft Windows Tutorial – Drawing Chemical Structures and Graphical Images. Advanced Chemistry Development, Inc. www.acdlabs.com – 132 p. URL: http://jj.mevel2.free.fr/contenu/seconde_2010/chimie/premiere_partie/cours/geometrie_molecules/chemsketch/chemsketch/chemsk_t12.pdf (дата звернення: 07.09.2024).

Навчальне видання

Слободнюк Руслан Євгенійович

**ЗАСТОСУВАННЯ РЕДАКТОРА ХІМІЧНИХ ФОРМУЛ
ACD/ChemSketch
У НАВЧАЛЬНО – МЕТОДИЧНІЙ РОБОТІ**

Методичний
посібник

Дизайн обкладинки Євгеній Мацишин

Формат 60x84/16. Наклад 100 прим.

Ум.-друк. арк. 2,6

Друк цифровий. Папір офсетний.

Підписано до друку 28.03.2025 р.

Замовлення № 80172

Надруковано з макету замовника

Друкарня ФОП Гуляєва В.М.

Свідоцтво суб'єкта видавничої справи ДК № 6205

Київська обл., м. Обухів, вул. Васильківська, 2а

067 178 37 97

drukaryk.com