

ACD/3D Viewer

Версия 8.0 for Microsoft Windows

Руководство пользователя

***Просмотр 3D структур и
вычисление структурных
параметров***

Advanced Chemistry Development, Компания.

Авторское право © 1997–2004 Advanced Chemistry Development, Компания. С сохранением всех прав.
ACD/Labs – торговая марка Advanced Chemistry Development, Компании.

Microsoft и Windows – зарегистрированные торговые марки корпорации Microsoft в Соединённых Штатах и/или в других странах авторское право © 2003 Microsoft Corporation. С сохранением всех прав.

IBM – зарегистрированная марка корпорации International Business Machines авторское право © IBM Corporation 1994, 2003. С сохранением всех прав.

Adobe, Acrobat, PDF, Portable Document Formats, и связанные с структурными данными и операторами являются или зарегистрированными торговыми марками или торговыми марками Adobe Systems Incorporated в Соединённых Штатах и/или в других странах авторское право © 2003 Adobe Systems Incorporated. С сохранением всех прав.

Все другие торговые марки, упомянутые в пределах этого руководства для пользователя – собственность их законных владельцев.

Все торговые марки подтверждены.

Информация, содержащаяся в данном документе, может быть изменена без предварительного уведомления. Advanced Chemistry Development, компания, не даёт никаких гарантий относительно этого материала включительно, но не ограничивает предполагаемые гарантии высокого спроса и пригодности для специфической цели. Advanced Chemistry Development, компания, не отвечает за ошибки, содержащиеся здесь или за любые прямые, косвенные, специальные, непредвиденные или последующие ущербы связанные с использованием этого материала.

Перевод на русский язык выполнила Татьяна Радзявичене, замечания, отзывы и предложения о переводе шлите по электронному адресу tatrad2000@yahoo.com.

Содержание

Прежде чем Вы начнёте.....	ii
Об этом руководстве пользователя.....	ii
<i>Подробное объяснение.....</i>	<i>ii</i>
Действия выполняемые мышью.....	iii
Для получения дополнительной информации.....	iii
<i>Как войти в контакт с нами.....</i>	<i>iv</i>
<i>Интерактивные обновления.....</i>	<i>iv</i>
1. Введение.....	1
1.1 Что такое ACD/3D Viewer?.....	1
1.2 Алгоритм 3D - оптимизации.....	1
1.2.1 <i>Ограничения оптимизации ACD/3D.....</i>	<i>2</i>
2. Основы ACD/3D Viewer.....	3
2.1 Цели.....	3
2.2 Запуск ACD/3D Viewer.....	3
2.3 Установка файловых ассоциаций.....	4
2.3.1 <i>Изменение файловых ассоциаций.....</i>	<i>4</i>
2.4 Изменение каталога значений по умолчанию.....	4
2.5 Выход из ACD/3D Viewer.....	5
3. Управление изображением молекул.....	6
3.1 Цели.....	6
3.2 Вставление молекулы и её 3D оптимизирование.....	6
3.3 Настройка изображения молекулы.....	7
3.3.1 <i>Вращение, перемещение и изменение масштаба изображения.....</i>	<i>7</i>
3.3.2 <i>Изменение изображения структуры.....</i>	<i>8</i>
3.3.3 <i>Изменение цвета.....</i>	<i>9</i>
3.3.4 <i>Получение зеркального изображения.....</i>	<i>10</i>
3.3.5 <i>Инверсия центра структуры.....</i>	<i>10</i>
3.3.6 <i>Изменение радиуса определённого атома.....</i>	<i>10</i>
3.3.7 <i>Изменение дисплея радиуса атома.....</i>	<i>11</i>
3.4 Сохранение и загрузка параметров настройки изображения.....	11
3.4.1 <i>Сохранение параметров настройки изображения.....</i>	<i>11</i>
3.4.2 <i>Загрузка параметров настройки изображения.....</i>	<i>12</i>
3.4.3 <i>Установка параметров настройки изображения по умолчанию.....</i>	<i>12</i>
3.5 Вычисление и изменение структурных параметров.....	12
3.5.1 <i>Вычисление и изменение расстояния между двумя атомами.....</i>	<i>12</i>
3.5.2 <i>Вычисление и изменение угла между двумя связями.....</i>	<i>13</i>
3.5.3 <i>Вычисление и изменение торсионного угла.....</i>	<i>14</i>
4. Создание GIF анимации.....	15
4.1 Получение программного обеспечения анимации.....	15
4.2 Пошаговое движение в ACD/3D Viewer.....	16
4.3 Утончённая настройка изображения.....	17
4.4 Получение серии gifов.....	18
4.5 Заключительная стадия: анимация.....	19

Прежде чем Вы начнёте

Спасибо, что Вы приобрели программу просмотра ACD/3D Viewer! Мы пытались создать самую лёгкую из доступных на сегодняшний день программ для просмотра структур 3D.

Об этом руководстве пользователя

Это руководство поможет Вам быстро и эффективно научиться работать с программой просмотра ACD/3D Viewer, это руководство может быть использовано интерактивно или в версии «бумажной копии».

Снимки экрана, демонстрируемые, на протяжении всего руководства были увеличены в сравнении с настоящим небольшим размером окна.

Цвета и другие свойства элементов окна, описанные повсюду в руководстве, соответствуют заданным по умолчанию свойствам дисплея окна.

Это руководство сохранено в электронном формате Adobe Acrobat. Если Вы не можете установить указатель на разделе, пожалуйста, найдите текстовую строку с нужным словом, фразой, или связкой слов.

Подробное объяснение


Данное руководство является частью технической документации ACD/Labs программного обеспечения. Для постепенного изучения программы ACD/Labs, мы рекомендуем следующий порядок работы с технической документацией, которая ознакомит Вас с особенностями рисования и поиска структур:

Документы ACD/ChemSketch и ACD/Dictionary ознакомят Вас с особенностями рисования и поиска структур.

Программа ACD/Forms Manager необходима, для того чтобы научиться создавать диалоговые окна для данных пользователя и для последовательного ввода данных в интерфейс.

Действия, выполняемые мышью

Вы можете в течение работы с этим программным обеспечением мышью выполнять некоторые действия, описать которые можно этими словами:

- **Точка** перемещение указателя  в нужную точку.
- **Щелчок**, щёлкнув левой клавишей мыши, указывают на определённую точку.
- **Правый щелчок**, щёлкнув правой клавишей мыши, указывают на определённую точку.
- **Двойной щелчок**, быстро два раза щёлкнув левой клавишей мыши, указывают на определённую точку.
- **Перетаскивание**, нажимая и удерживая левую клавишу мыши, указывают на определённую точку и перетаскивают выбранный объект.
- **Выбор**, щёлкнув или переместив указатель на интерфейсный элемент, он высвечивается или активизируется (возможны и другие действия, если они предусмотрены в документации). Если используется функция «выбор переключателя», то переключатель должен быть помечен флажком (в противоположность функции «очистка переключателя» когда переключатель должен быть очищен, без метки).

Для получения дополнительной информации...

Чтобы ознакомиться с последними новостями программного обеспечения ACD/Labs и предоставляемыми услугами, пожалуйста, посетите информационный узел

<http://www.acdlabs.com/>

Услугами этого сайта пользуются несколько десятков тысяч посетителей в день. Причина этого: множество предложений на нашем Web-сайте. Начиная с весны 2004 года, мы предлагаем бесплатно ChemSketch 5.0 программу, бесплатно ISIS 3D приложение, бесплатно ChemDraw расширения, и бесплатно 2-недельную демонстрационный код для "Interactive Laboratory" сеансов, где Вы можете выполнять опытные вычисления, использующие Java апплеты без купленного программного обеспечения. Имеется TechSmith Camtasia - база кинофильмов, которые иллюстрируют операции, выполняемые многими нашими пакетами программ (особенно ChemSketch) их можно загрузить. Информация нашего Web-сайта постоянно обновляется. Наш информационный узел сообщит Вам, какие научные конференции Вы можете посещать в кабине ACD/Labs. Вы можете просмотреть страницу часто задаваемых вопросов или «заглянуть» в наш чат и присоединиться к дружеской беседе, которая осуществляется через нашу страницу в сети Интернета.

Если Вы хотите получать по электронной почте самые последние новости о программном обеспечении ACD/Labs, пожалуйста, убедитесь что Вы подписались на это на странице нашего Web-сайта:

<http://www.acdlabs.com/feedback/mailing.html>

Если Вы хотите участвовать в ChemSketch конференции, пожалуйста, обратитесь по адресу:

<news://news.acdlabs.com/acd.public.chemsketch>

Как войти в контакт с нами

Мы доступны через наш Web-сайт, телефон, факс, и обычную почту, но более популярный способ вхождения в контакт с нами – по электронной почте. Вопросы о ценах, продаже, доступности, и общих проблемах должны направляться по адресу:

info@acdlabs.com

Вопросы о технической и научной поддержке должны направляться по адресу:

<http://support.acdlabs.com>

Пожалуйста, сообщите нам название (имя) покупателя программы; название купленного изделия, номер версии, номер конструкции, и лицензионный ID изделия, которое Вы хотите обсудить с нами (в **Help** меню, выберите **About**, где и найдёте эту информацию); также опишите проблемы, которые вас волнуют. Если Вы не имеете ничего против этого, пожалуйста, сообщите нам название дистрибутора, у которого вы купили программное обеспечение.

Интерактивное обновление

Версия 5.0 и поздние версии PC-based ACD/Labs программного обеспечения имеют способность к программной модификации, доставляемой интерактивно. Для этого Вам будет нужен номер регистрации программного обеспечения и компьютер, на котором установлено программа, подключенный к Интернету. Обновление небольших файлов, например, меняет фактический номер версии с 8.00 на 8.01. Пожалуйста, ознакомьтесь с документом "Online Updates," который находится в вашей папке документов, для получения дополнительной информации, или по электронной почте обратитесь к нашему отделу технической поддержки.

1. Введение

1.1 Что такое ACD/3D Viewer?

ACD/3D Viewer – программа быстрого и точного моделирования и визуализации структур. Она полностью связана с программой ACD/ChemSketch, что позволяет Вам рисовать структуры 2D и быстро получать из них прекрасные цветные 3D изображения. С программой ACD/3D Viewer Вы сможете:

- Управлять 3D моделями: перемещать, вращать 2D и 3D изображения, изменять размер, стили и цвета;
- Отобразить 3D структуру в виде стержней, стержней и шаров, сфер или дисков;
- В 3D структуры твёрдых веществ добавлять изображение границ окутывающих сил Ван-дер-Ваальса в виде мелких точек;
- Измерять и изменять длину связей, углы между плоскостями связей и торсионных углов ;
- Оптимизировать структуры, используя силовые поля 3-D CHARMM-типа;
- Щелчком кнопки в окне программы ACD/ChemSketch переключаться от 3D дисплея к 2D;
- Пользоваться конфигурацией автономного вращения 3D молекулы, с/или без изменения стиля показа структуры;
- Рассматривать 3D структуру в перспективе;
- Отображать многократные связи в режиме показа вращения проволочных структур (Wireframe); и
- Экспортировать 3D модели в другие программы геометрических оптимизаций и использовать их как хорошие стартовые конфигурации.

1.2 Алгоритм 3D- оптимизации

Алгоритм 3D оптимизации быстро преобразовывает плоскую (2D) структуру созданную в программе ACD/ChemSketch в реалистическую 3D структуру. Это основано на изменении молекулярной механики, которая принимает во внимание длину связей, величину угла, внутреннее вращение и не создающих связей Ван-дер-Ваальсовых взаимодействий. Модификации включают незначительные упрощения потенциальных функций и осуществление схемы минимизации дополнительными эвристическими алгоритмами для «плохо ведущих себя» стартовых конфигураций.

Алгоритм 3D оптимизации – патентная версия молекулярного механизма с силовыми полями, первоначально основанными на CHARMM параметрах.¹ Модификации включают некоторые упрощения и были предназначены для увеличения стабильности и скорости вычисления. Обратите внимание, что 3D оптимизация НЕ является полномасштабным молекулярным двигателем. Она скорее стремится воссоздать как можно ближе действительности соответствующие 2 D конфигурации (возможно очень неблагоприятные), чем точно оптимизировать 3D структуры.

¹ Обратитесь к B.R. Brooks, R.E. Bruccoleri, B.D. Olafson, D.J. States, S. Swaminathan, и M. Karplus. CHARMM: программа для макромолекулярной энергии, минимизации и динамических вычислений. *J. Comput. Chem.* 4 187–217 (1983).

Иногда 3D оптимизация производит молекулярную конфигурацию отличную оттого, что Вы ожидали. Это отражает саму сущность структурного анализа – молекулы обычно имеют несколько возможных конфигураций. Оптимизатор находит только одну и она не обязательно та, которую Вы ожидали. Например, Вы, вероятно, ожидаете, что фрагмент циклогексана будет иметь форму кресла, но оптимизатор может произвести искривлённую форму - лодки, которая так же является одной из возможных конфигураций (в действительности этот фрагмент существует в искривлённой форме во многих структурах). Чтобы получить другую конфигурацию в полученной 3D структуре переместите некоторые её атомы, чтобы сделать начальную структуру ближе к окончательной конфигурации и затем оптимизируйте структуру ещё раз.

Если Вы пробуете получить в процессе оптимизации определённый энантиомер для структур с хиральными центрами, вводимая конфигурация может измениться к одной из противоположных форм. Чтобы решить эту проблему, обычно достаточно рисуя поменять местами все четыре хиральных углеродных атома и установить нужное направление связей в начальной 2D структуре, для этого используя оба инструмента **Up** (Вверх) и **Down Stereo Bond** (Вниз Стерео связи). Если это не поможет, Вы можете вручную переместить атомы в заключительной 3D формуле и оптимизировать структуру ещё раз. В любом случаи мы рекомендуем ответить «Нет», когда Вас спросят в открывающемся диалоговом окне, о том хотите ли Вы удалить водородные атомы перед начальной оптимизацией.

1.2.1 Ограничения оптимизации ACD/3D

ACD/3D Viewer программа может оптимизировать только структуры содержащие атомы от водорода до ксенона со стандартной валентностью и в связанных состояниях. Также она не принимает во внимание водородные связи.

В структуре молекулы подвергающейся оптимизированию не может быть более 250 атомов, включая и число невидимых водородных атомов.

2. Основы ACD/3D Viewer

2.1 Цели

В этой главе Вы узнаете как:

- Запустить программу;
- Установить и изменить файлы ассоциаций;
- Изменить заданные по умолчанию каталоги открытых и сохранённых файлов;
- Выйти из программы.

Инструкции о системных требованиях, монтаже и демонтаже программного обеспечения поставляются на отдельном листе бумаги вместе с высылаемым программным обеспечением.

2.2 Запуск ACD/3D Viewer

Чтобы запустить программу ACD/3D Viewer на своём компьютере следуйте за этими основными шагам:

1. Запустите Microsoft Windows.
2. Дважды щёлкните на значке 3D Viewer.

-ИЛИ-

Из меню **Start/Run** (Запуск/Выполнить) в Windows 98/2000, NT или XP на панели задач отметьте **ACD/Labs** и затем выберите значок ACD/3D Viewer.

-ИЛИ-

Дважды щёлкните на папке программных файлов SHOW3D.EXE где вы установили всё программное обеспечение ACD/Labs. По умолчанию это ACD8.

-ИЛИ-

Если Вы по другому запустили программу ACD/Labs, в меню **ACD/Labs** выберите **3D Viewer**.

Вы должны увидеть открывающийся экран выпадающего списка. Если это программа свободно распространяемого обеспечения Вы увидите 15 секундную прокрутку списка ACD/Labs программ. Будьте терпеливы, щёлкните **Cancel** (Отмена), чтобы закончить её активацию.

2.3 Установка файловых ассоциаций

Если Вы запускаете программу в первый раз, то увидите появляющееся диалоговое окно **File Associations** (Файловые ассоциаций).

Примечание, когда вы открываете диалоговое окно **File Associations** (из меню **File** (Файл), выберите **File Associations**) в Windows NT, Вы не имеете никаких прав изменить файловые ассоциации, предупреждение об этом вы увидите в появляющемся сообщении. Чтобы решить этот вопрос войдите в контакт с Вашим системным администратором.

В нём содержится список расширений файла и типы файлов, которые Вы можете захотеть открыть автоматически с программным обеспечением ACD/Labs. Если это так, установите флажки тех файловых форматов, которые Вы хотите добавить и затем щёлкните **Yes**. Если Вы не хотите или неуверенны, что хотите иметь ChemSketch автоматически открываемые файлы с перечисленными расширениями, оставьте флажки неустановленными и щёлкните **No**.

2.3.1 Изменение файловых ассоциаций

Если Вы выбрали не все форматы файловых ассоциаций, заданных по умолчанию, их можно в любое время пересмотреть и изменить; в меню **File** (Файл), выберите **File Associations** (Файловые ассоциаций).

Примечание если Вы выбрали **File Associations** соответствующие Windows NT, но не имеете право на изменения в системе файловых ассоциаций, появится предупреждающее об этом сообщение. Свяжитесь с Вашим системным администратором, чтобы решить этот вопрос.

Если Вы выбрали все форматы, то получите сообщение, "all supported file types are already associated with the current application" (все поддерживаемые типы файлов уже связаны с текущим приложением). В этом случае, Вы можете изменять файловые ассоциации через **Windows Explorer**.

1. Откройте Windows Explorer, и выберите файл с расширением, для которого вы хотите создать ассоциацию.
2. Удерживая клавишу SHIFT, щёлкните правой клавишей мыши на файле. В открывшемся меню, выберите **Open With** (Открыть с). Обратите внимание, что в некоторых операционных системах Windows (например, Windows XP) Вы не должны нажимать клавишу SHIFT, чтобы получить команду Open With в подручном меню.
3. Установите приложение, которое должно использоваться, для открытия файла и выберите **Always use this program** (всегда использовать этот переключатель программы).
4. Щёлкните **OK** и закройте Windows Explorer.

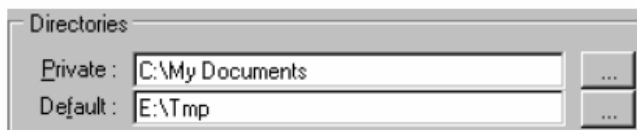
2.4 Изменение каталога значений по умолчанию

Если Вы пользуетесь односторонней (автономной) копией ChemSketch, параметры настройки основного каталога, вероятно хороши.

Если Вы пользуетесь сетевой копией, желательно изменить параметры настройки основного каталога в ACD/Labs программном обеспечении так, чтобы заданный по умолчанию диск для сохранения работы в прогрессе был бы местный жёсткий диск пользователя, а не отдалённый сервер. После

создания местного доступа для ограниченного и неограниченного количества мест, для каждой последующей местной инсталляции:

1. В ChemSketch окне, в меню **Options** (Опции), выберете **Preferences** (Установки).
2. Нажмите на табличке **General** (Общие). В окошке **Default** (Предусмотренный) определяют каталог, который будет открыт каждый раз, как только Вы откроете диалоговые окна **Import** (Импорт), **Open** (Открыть), **Save** (Сохранить), или диалоговое окно **Export** (Экспорт) в ChemSketch окне:




Примечание, В **Private** (Личный) окне Вы можете установить каталог для регистрации конфигурации программы ChemSketch (например, файлы TEMPLATE.CFG и GRSTYLES.STL).

3. Щёлкните **ОК**.
4. Переключитесь к 3D - из меню **Options** (Опции) выберете **Set Default Folder** (Набор предполагаемых папок) и определите папку необходимую для открытия и сохранения файлов. Щёлкните **ОК**.

2.5 выход из ACD/3D Viewer

Вы можете выйти из программы одним из следующих способов:

- Щёлкните  в верхнем правом углу области заголовка любого окна.
-ИЛИ-
- Из меню ACD/Labs, выберете **Close All** (Закреть всё). Так вы закроете все программы ACD/Labs одна за другой, которые являются в настоящее время открытыми.
-ИЛИ-
- Из меню **File** (Файл), выберете **Exit** (Выход). Так вы закроете только в настоящее время открытую программу ACD/Labs.

Вы будете запрошены о том, сохранить ли Вашу работу в форматах файла, соответствующих окну из которого Вы выходите.

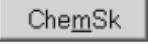

3. Управление изображением молекул

3.1 Цели

В этой главе Вы научитесь как:

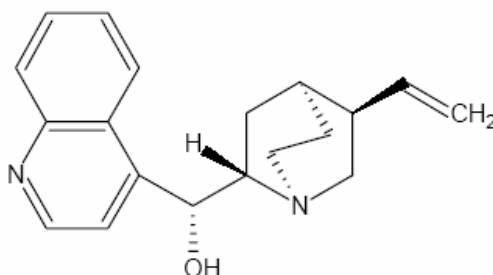
- Вставлять молекулу в окно 3D и её 3D оптимизировать;
- Настроить изображение молекулы (позиция, размер, цвет, радиус атома);
- Сохранить и загрузить параметры настройки изображения;
- Измерять и изменять расстояние между атомами и вычислять и изменять угол между связями.


3.2 Вставка молекулы и её 3D оптимизирование

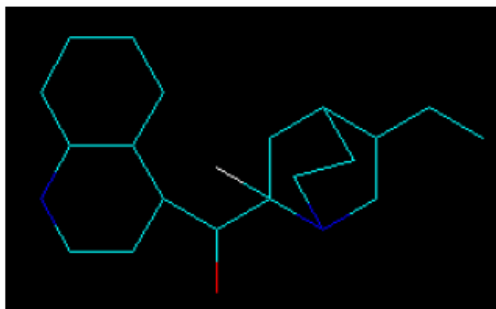
1. Запустите ACD/3D Viewer как описано выше.
2. Щёлкните **ChemSketch**  в полосе переключения окон. Это действие переключит Вас к ChemSketch окну.
3. Щёлкните **Словарь**  в верхней правой части окна.


Примечание, в свободно распространяемую ChemSketch версию модуль словаря не включён. Этот модуль доступен только для коммерческой версии, поэтому если Вы пользуетесь свободно распространяемой версией ChemSketch, рисуя любую желаемую структуру, пользуйтесь инструментальными средствами интерфейса ChemSketch. (Для выяснения деталей относительно рисования структур обратитесь к обучающей программе *ACD/ChemSketch Tutorial*.)

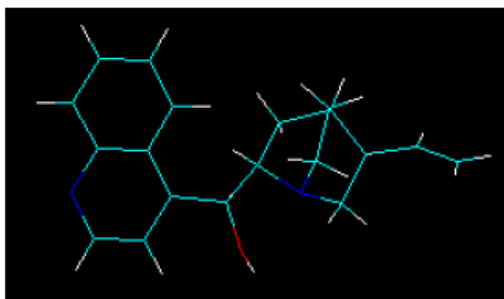
4. В блоке **Quick Search** (Быстрый поиск) в появляющемся диалоговом окне **ACD/Dictionary**, напечатайте несколькими нажатиями клавиш "*cinchonidine*" (цинхонидин). (Цинхонидин – анти-молярный агент, который извлекается из коры различных разновидностей цинхоны).
5. После выбора в списке необходимого названия и отображения соответствующей структуры, щёлкните **ОК**. Обратите внимание, что тень выбранной структуры висит рядом с курсором. Щёлкните на рабочем пространстве, чтобы поместить структуру в ChemSketch окне:



6. Щёлкните **Copy to 3D**  в полосе переключения окон, чтобы переместить молекулу в интерфейс ACD/3D Viewer. В 3D окне Вы увидите появившийся простой стержневой рисунок.



7. Чтобы создать 3D модель из 2D химической структуры, щёлкните **3D Optimization** (3D Оптимизация) . Обратите внимание, что при этом добавляются водородные атомы:





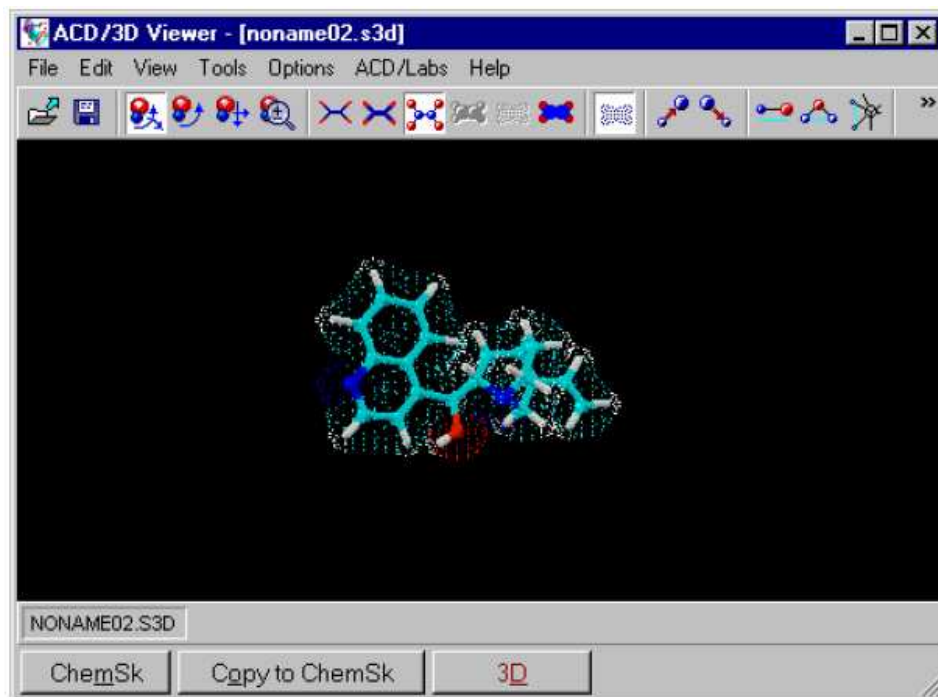
3.3 Настройка изображения молекулы

3.3.1 Вращение, перемещение и изменение масштаба изображения

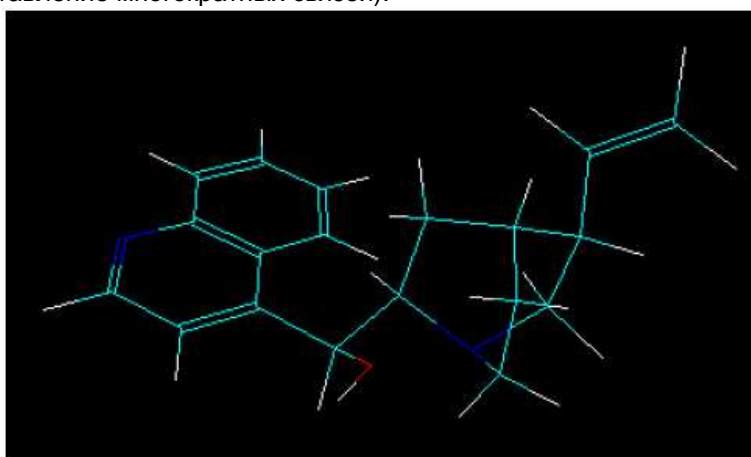
1. Щёлкните **3D Rotate** (3D вращение)  и переместитесь по рабочему пространству, чтобы вращать структуру в трёхмерном пространстве.
2. Теперь переключитесь к режиму Z-вращение, щёлкая **Rotate** (Вращение) . Если Вы теперь переместитесь по рабочему пространству, структура будет вращаться только в двухмерном пространстве.
3. Щёлкните **Move** (Перемещение) , чтобы включить режим Drag (перетаскивание), где Вы можете перемещать структуру в пространстве вниз, влево или вправо.
4. Чтобы изменять размер структуры, щёлкните **Resize** (Изменение размера)  и переместитесь. Перемещение от центра структуры к границам экрана – увеличивает размер структуры, перемещение к центру структуры делает её меньше.
5. Щёлкните **3D Rotate** , чтобы включить режим 3D вращения.



3.3.2 Изменение изображения структуры








1. Чтобы представить текущую структуру в виде шаростержневой, щёлкните **Balls and Sticks** (Шары и Стержни) .
2. Чтобы добавить ореол точек к текущему представлению молекулы, щёлкните **With Dots** (С точками) . Структура будет выглядеть приблизительно так:




3. Чтобы отобразить многократные связи, включите режим Wireframe (Проволочный), нажимая на инструментальной панели Top (Топ) и затем из меню **View** (Вид), выберите **Show Multiple Bonds** (Представление многократных связей):



4. Для того чтобы молекула подобно этой вращалась автоматически без изменения её стиля, щёлкните **Auto Rotate** (Автоматическое вращение) . (Чтобы вращать молекулу автоматически, изменяя её стиль, щёлкните **Auto Rotate and Change Style** .

Примечание, Чтобы представить структуру в виде дисков, проволок, точек, сфер. Щёлкают соответствующие кнопки на инструментальной панели (, ,  или ). Вы можете также щёлкнуть правой кнопкой мыши в рабочем пространстве окна, чтобы переключить тип кнопки режима представления. (Обратите внимание, если активировано любое из инструментальных средств мер (,  или ), щелчок правой кнопкой мыши переключает только эти кнопки.



3.3.3 Изменение цвета

1. В меню **Options** (Опции), выберите **Colors** (Цвета) или щёлкните **Set Colors** (Набор цветов) , чтобы отобразить диалоговое окно **Colors**



2. Чтобы изменить цвет фона дисплея выберите желательный цвет в окошке Background (Фон). **Совет**, Если Вы печатаете часто и много лучше всего установите белый цвет фона, чтобы сэкономить чернила.
3. После установления размеров, наборов атомов, расстояния и углы между которыми имеют определённые значения, устанавливается специальный цвет подсветки. Этот цвет по умолчанию ярко зелёный. Чтобы изменять цвет выбранных атомов, в списке **Selection** (Выбор) выберите желаемый цвет и щёлкните **OK**.


Примечание, выбор работает отдельно с инструментальными средствами **Distance**

(Расстояние) , **Angle** (Угол)  и **Torsion Angle** (Торсионный угол).


4. Чтобы изменить цвет химического элемента, щёлкните на названии элемента в списке и затем выберите желаемый цвет в окошке справа.


Примечание, установив флажок **Alphabetical Order** (Алфавитный порядок) названия элементов в списке устанавливаются в алфавитном порядке. В противном случае, они располагаются соответственно своему месту в Периодической таблице элементов.


3.3.4 Получение зеркального изображения

1. Щёлкните **Mirror** (Зеркало) , чтобы получить зеркальное изображение в настоящее время изображённой структуры. В этом случае весь порядок стерео центров в начальной структуре будет инвертирован.
2. Чтобы вернуться назад к начальному виду, щёлкните эту кнопку снова.

3.3.5 Инверсия центра структуры

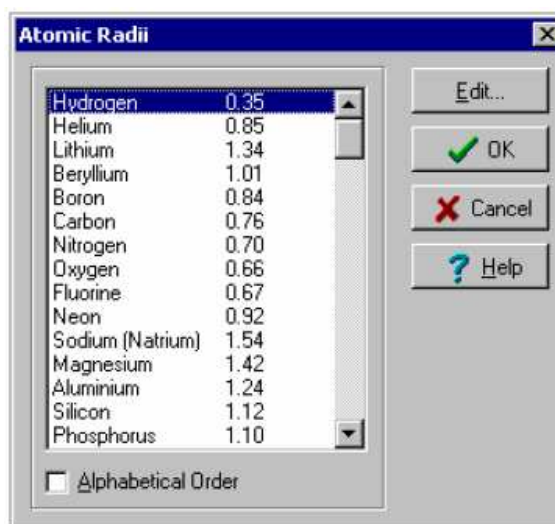
1. Щёлкните **Invert Center** (Инверсия центра) , и затем щёлкните на атоме, чтобы инвертировать его. Этот инструмент инвертирует конфигурацию хирального центра, изменяя пространственную позицию одного или нескольких замещённых выбранных атомов.

Примечание, После этой операции может возникнуть потребность оптимизировать химическую структуру ещё раз. Чтобы это осуществить щёлкните **3D Optimization**  (3D оптимизация) на инструментальной панели Top.

2. Чтобы вернуться назад к начальному виду, щёлкните снова **Invert Center** .

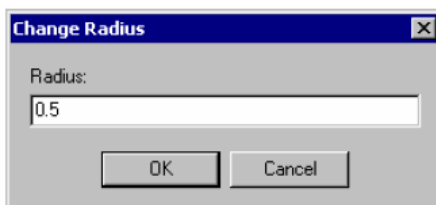
3.3.6 Изменение радиуса определённого атома

1. В меню **Options** (Опции) выберите **Radii** (Радиус), чтобы открыть диалоговое окно **Atomic Radii** (Радиус атома) содержащее параметры по умолчанию радиусов атомов различных элементов:



2. Чтобы увидеть в настоящее время радиус любого элемента, щёлкните на нём в списке. В первом столбце высвечивается соответствующее значение.

3. Чтобы изменить радиус атома элемента дважды щёлкните на нём в списке и напечатайте новое значение, например, 0.5 в появляющемся блоке **Change Radius** (Изменение радиуса).





4. Щёлкните **OK** чтобы подтвердить изменения.

Примечание, атомный радиус выражен в относительных единицах.

4. Выполнив изменения в диалоговом окне **Atomic Radii** (Атомный радиус), щёлкните **OK**. Следующий раз, запуская программу ACD/3D Viewer заданные по умолчанию значения, будут сброшены к их предыдущим значениям. Для получения более детальной информации о том, как сохранять и загружать параметры по умолчанию обратитесь к разделу 3.4.

3.3.7 Изменение дисплея радиуса атома

1. Щёлкните **Increase Atoms' Radii by 5%** (Увеличение радиуса на 5%) . Каждый дополнительный щёлчок этой кнопки увеличивает размер радиуса изображённых атомов на 5%.
2. Щёлкните **Decrease Atoms' Radii by 5%** (Уменьшение радиуса на 5%) , чтобы уменьшить размер всех изображённых атомов на 5%.

Важно, эти инструментальные средства не затрагивают фактических размеров радиусов атомов (определённых в диалоговом окне **Atomic Radii**), а только изменяют дисплей.

3.4 Сохранение и загрузка параметров настройки изображения

Вы можете сохранить параметры настройки, которые Вы определили в течение текущего занятия как файл .3DS, загружая их от предварительно сохранённого файла и устанавливая как новое значение по умолчанию.

3.4.1 Сохранение параметров настройки изображения

1. Из меню **Options** (Опции), выберите **Save Settings** (Сохранение изменений), чтобы отобразить следующее диалоговое окно.



2. Установите флажки тех признаков, которые вы хотели бы сохранить. Обратите внимание, что установление флажка **Radii** (Радиус) позволит сохранить параметры настройки, указанные в диалоговом окне **Atomic Radii** (Радиус атома), но не текущие опции дисплея радиуса (см. разделы 3.3.6. и 3.3.7).

3. В появляющемся диалоговом окне, определите название файла и местоположения (диск и каталог) и щёлкните **OK**. Обратите внимание, что файл должен быть сохранён с расширением **.3DS**.
4. Щёлкните **Save** (Сохранить), чтобы сохранить файл.

3.4.2 Загрузка параметров настройки изображения

Если Вы предварительно сохранили параметры настройки, Вы можете их загрузить и для текущего сеанса.

1. В меню **Options** (Опции) выберите **Load Settings** (Загрузка параметров), чтобы открыть диалоговое окно **Load Settings**.
2. Найдите **.3DS** файл, который Вы хотите загрузить.
3. Щёлкните **Open** (Открыть). Параметры настройки содержащиеся в этом файле, будут загружены во время текущего рабочего сеанса.

3.4.3 Установка параметров настройки изображения по умолчанию



Если Вы хотите использовать определённые параметры настройки, каждый раз, когда Вы работаете с программой ACD/3D Viewer, Вы должны установить их как заданные по умолчанию.

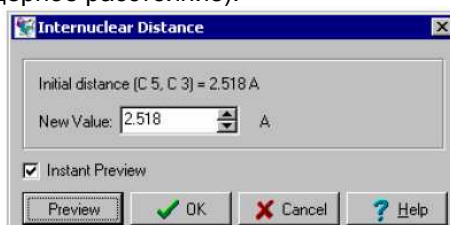
1. Определите требуемые параметры настроек представления (обратитесь к разделу 3.3).
2. Сохраните их в файле, для этого в меню **Options** (Опции) выберите **Save Settings** (Сохранить изменения).
3. В меню **Options** выберите **Set Default Settings** (Набор предполагаемых изменений).
4. Найдите файл с установкой, которую Вы хотите установить как значение по умолчанию.
5. Щёлкните **Open** (Открыть). Теперь всякий раз, когда Вы откроете ACD/3D Viewer, эти параметры настройки будут загружаться, пока Вы не установите другие.

Совет, Чтобы вернуться к системным параметрам по умолчанию, в меню **Options** выберите **Restore Default Settings** (Восстановление предполагаемых изменений).

3.5 Вычисление и изменение структурных параметров

3.5.1 Вычисление и изменение расстояния между двумя атомами

1. Переключатель **Balls and Sticks** (Шары и стержни)  предлагает режим лучшего представления атомов.
2. Щёлкните **Distance** (Расстояние) .
3. Щёлкните на любом атоме, чтобы выбрать его, затем переместите указатель вверх другого атома, и щёлкните и на нём, чтобы высветить их оба выбранным цветом. Появляется диалоговое окно **Internuclear Distance** (Межъядерное расстояние):




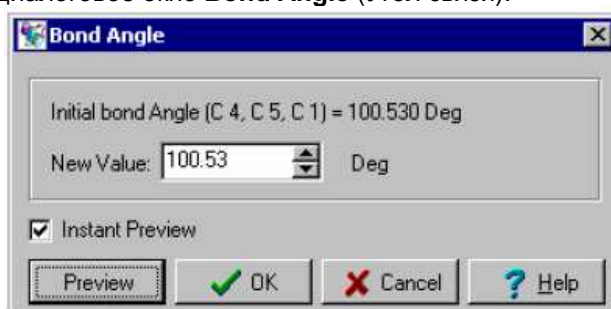
Здесь вы можете увидеть расстояние между выбранными атомами:

Distance (C 5, C 3) = 2.5180 Å

4. Желая изменить расстояние между атомами в диалоговом окне **Internuclear Distance**, печатают желаемое значение в блоке **New Value** (Новое значение). Если флажок **Instant Preview** (Немедленное применение) установлен, изменения немедленно применяются. Если флажок не установлен, после каждого изменения Вы должны щёлкнуть **Preview** (Применить). Начальное расстояние всегда представлено в диалоговом окне, если Вы решили не изменять расстояние, Вы можете легко вернуться к начальным параметрам настройки.
5. Щёлкните **OK**, чтобы применить изменение (любое) и закройте диалоговое окно.
6. Чтобы отменить выбор и запустить новое изменение, нажмите где-нибудь на пустом месте рабочего пространства.

3.5.2 Вычисление и изменение угла между двумя связями

1. Щёлкните **Angle** (Угол) .
2. Щёлкните на двух соседних атомах, создающих между собой связь.
3. Переместите указатель на третий атом, который образует связь с последним выбранным атомом. Откроется диалоговое окно **Bond Angle** (Угол связи):




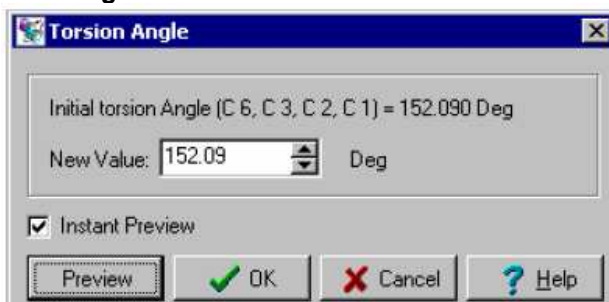
Также, в строке состояния появляется рассчитанное угловое значение, например,

Bond Angle (C 4, C 5, C 1) = 100.530 Deg

4. Чтобы изменить значение угла, в диалоговом окне **Bond Angle** (Угол связи), печатают желаемое значение в блоке **New Value** (Новое значение). Если флажок **Instant Preview** (Немедленное применение) установлен, изменения немедленно применяются. Начальный угол всегда представлен в диалоговом окне, если Вы решили не изменять угол, Вы можете легко вернуться к начальным параметрам настройки.
5. Щёлкните **OK**, чтобы применить изменение (любое) и закройте диалоговое окно.
6. Чтобы отменить выбор и запустить новое изменение, нажмите где-нибудь на пустом месте рабочего пространства. Чтобы прекратить использование этого инструмента, нажмите на его кнопке, чтобы снять выделение.

3.5.3 Вычисление и изменение торсионного угла

1. Щёлкните **Torsion Angle** (Торсионный угол) .
2. Щёлкните на двух атомах образующих общую связь. Соответствующая связь становится выбранной.
3. Точно таким же образом щёлкните ещё на двух атомах смежных с ранее выбранной связью. В результате будут выбраны три смежных связи, создающие торсионный угол. Появляется диалоговое окно **Torsion Angle**:



Примечание, не выбрав третью связь, можно просмотреть значения всех возможных углов вращения, граничащих с последним выбранным атомом, перемещая указатель по смежным атомам.

4. Попробуйте изменить значение в блоке **New Value** (Новое значение). Если флажок **Instant Preview** (Немедленное применение) установлен, изменения немедленно применяются. Начальный торсионный угол всегда представлен в диалоговом окне, если Вы решили не изменять угол, Вы можете легко вернуться к начальным параметрам настройки.
5. Щёлкните **OK**, чтобы применить изменение (любое) и закройте диалоговое окно.
6. Чтобы отменить выбор и запустить новое изменение, нажмите где-нибудь на пустом месте рабочего пространства. Чтобы прекратить использование этого инструмента, нажмите на его кнопке, чтобы снять выделение.

4. Создание GIF анимации

С помощью ACD/3D Viewer Вы можете создавать для своего сайта GIF анимационные файлы с приложением минимальных усилий, по минимальной цене и с максимальной эффективностью. GIF файлы не являются такими сложными как Java, Flash, ActiveX или как химически ориентированные форматы типа RasMol и Chime, но эти новейшие приложения не могут быть доступными для случайных посетителей Web-сети, потому что для их просмотра необходимо иметь соответствующее соединение или достаточно быстрое подключение. Истинная доступность .GIF файла – всё ещё камень преткновения в создании конструкции Web-сети. GIF анимация – прекрасная черта многих Web –страниц. Например, Гиф анимацию можно применять для выделения чего-либо на странице (например, "New" ("Новое") – автоматически обновляемые области на странице загрузки ACD/LAB) или для иллюстрации показа чего-либо, это является более наглядным средством (например, распределение электронной плотности в ходе реакции Дильса - Альдера (Diels-Alder).

4.1 Получение программного обеспечения анимации

GIF анимация может быть создана с обычным доступным программным обеспечением типа пакетов перечисленных на сайте Tucows². Такое программное обеспечение чаще всего бывает свободно распространяемым, оценочно установленным или общего пользования. (Оговорка: ACD/Labs не рекомендует и не требует определённых изделий анимации). Для настоящего примера, мы использовали Animagic общего пользования от программного обеспечения компании RTL. Установка или копия общего пользования могут быть загружены от Web-страницы:

<http://www.rtlsoft.com/animagic>

и устанавливается на Вашем персональном компьютере (ПК).

GIF анимационный файл может быть создан, последовательно связывая одни за другими неподвижные или фотографические GIF изображения. Каждый последующий GIF содержит почти то же самое изображение как предыдущий GIF, но изменений в нём достаточно, чтобы создать человеческому глазу иллюзию движения, вовремя показа одно за другими GIF изображений. Хорошее программное обеспечение анимации оптимизирует редактирование так, чтобы размер всего анимационного GIF изображения был как можно меньше.

Экспорт ChemSketch или 3D файла в несложный GIF формат. Набор этих GIFов используется как ввод в специальную программу GIF-анимации, которая переведёт перемещающееся изображение (после определённого редактирования и оптимизации) в формат GIF анимации. Эти шаги мы рассмотрим подробнее ниже.

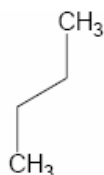
² Tucows – акроним огромной коллекции программного обеспечения для Windows.

См. www.tucows.com

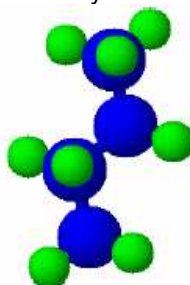
4.2 Пошаговое движение в ACD/3DViewer





Мы начнём с очень простой структуры – бутана, которая является несложной для рисования и обработки.

1. В окне ChemSketch выберите режим структуры (Structure), нарисуйте бутан:



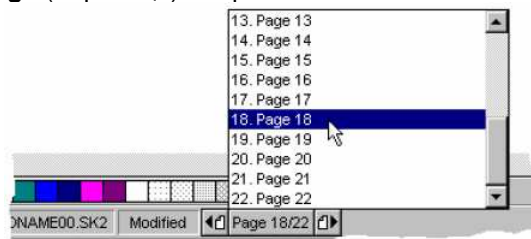
2. Щёлкните **Copy to 3D** (Копирование в 3D)  в полосе переключения окон.
3. В окне 3D щёлкните **3D Optimization** (3D оптимизация) , чтобы оптимизировать структуру.
4. Нажмите переключатель **Balls and Sticks** (Шары и стержни)  и щёлкните несколько раз **Increase Atom's Radii** (Увеличить радиусы атомов) , чтобы сделать атомы более видимыми.
5. В меню **Options** (Опции) выберите **Colors** (Цвета) и в диалоговом окне в разделе **Element** (Элемент) выберите зелёный цвет для водорода и синий для углерода. В разделе **Background** (Фон) выберите **White** (Белый). Вы должны получить что-то вроде этого:



6. Теперь скопируйте молекулу в буфер обмена; в меню **Edit** (Правка) выберите **Copy** (Копирование).
7. Переключитесь к окну ChemSketch, щёлкая на **ChemSketch**  на полосе переключения окон.
8. Если на странице уже есть рисунок, создайте новую страницу, нажимая .
9. Нажмите комбинацию CTRL+V, чтобы сделать быструю вставку изображения в буфер обмена. Нажмите на рабочем пространстве, чтобы поместить изображение.
10. Переключитесь назад в окно 3D, щёлкая **3D** , удостоверьтесь, что режим 3D вращения включён  и слегка вращайте структуру, перемещаясь по ней.
11. Снова скопируйте структуру в буфер обмена, переключитесь к ChemSketch окну, создайте новую страницу и вставьте структуру.
12. Повторяйте шаги, описанные выше, до тех пор, пока Ваша структура окажется в той же самой позиции, в которой она была в первом шаге.








Совет чтобы заставить вращаться структуру строго горизонтально и равномерно, перетаскиваете курсор каждый раз строго горизонтально и в том же самом месте.

13. Переключитесь к окну ChemSketch. В результате повторных вставок в новые страницы Вы должны иметь документ, состоящий из нескольких страниц каждая из которых содержит «снимок» вращающейся молекулы. Вы можете проверять число страниц и переключаться между ними, щёлкая **Page** (Страница) в строке состояния:



4.3 Утончённая настройка изображения


Если Вы просмотрите все изображения, то заметите, что размеры их различны. Это затронет и заключительную анимацию и сделает её неровной. Если Ваше программное обеспечение анимации позволяет вам изменять размер используемого гифа и изменять его содержание, Вы можете пропустить этот раздел и сделать необходимые изменения в программном обеспечении анимации. Если Вы используете программное обеспечение, не обладающее этими способностями, Вы можете использовать режим рисования (Draw) в ACD/ChemSketch, чтобы помочь стандартизировать изображение каждого снимка.

1. Откройте страницу с самым большим изображением.
 2. В режиме Draw (Рисование) выберите инструмент **Rectangle** (Прямоугольник)  и переместитесь по изображению молекулы так, чтобы прямоугольник полностью охватил молекулу. Отпустите клавишу мыши, чтобы установить прямоугольник и щёлкните **Send to Back** (Ниже остальных) , чтобы послать фон прямоугольника так, чтобы молекула стала видна.
 3. Нажмите комбинацию клавиш CTRL+A, чтобы выбрать два объекта, щёлкните **Center Horizontally** (Центрировать горизонтально)  и затем **Center Vertically** (Центрировать вертикально) , чтобы выровнять связанные между собой объекты.
 4. Если Вы не хотите, чтобы граница прямоугольника была видна, выберите только прямоугольник и затем щёлкните правой клавишей мыши в цветовой палитре на цвете **None** (Бесцветный), чтобы установить цвет границы. Щелчок левой клавишей мыши на любом цвете палитры изменит заполняющий цвет прямоугольника – это может быть полезно, когда Вы применяете любой специальный цвет фона при копировании молекулы в окне 3D.
- Примечание**, если Вы не видите никакой цветовой палитры, обратитесь к меню **Options** (Опции) и откройте диалоговое окно **Preferences** (Установки) где в секции **View** (Вид) раскройте вкладку **General** (Общие) и установите флажок **Palette** (Палитра).
5. Как только прямоугольник приобретает желаемый цвет и размер, выберите его и скопируйте в буфер обмена так, чтобы Вы могли вставить его непосредственно в другие снимки.
 6. Переключитесь к следующей странице, нажмите CTRL+V и щёлкните на молекуле, чтобы вставить её в прямоугольник. Тогда щёлкните **Send to Back** (Ниже остальных) , нажмите CTRL+A, чтобы выбрать оба объекта и выровняйте их, щёлкая **Center Horizontally** (Центрировать горизонтально)  и **Center Vertically** (Центрировать вертикально) .
 7. Повторите шаг 6 для всех страниц.

4.4 Получение серии gifов

1. Просмотрите список страниц ChemSketch и откройте первое 3D изображение (вероятно это страница 1 или 2).

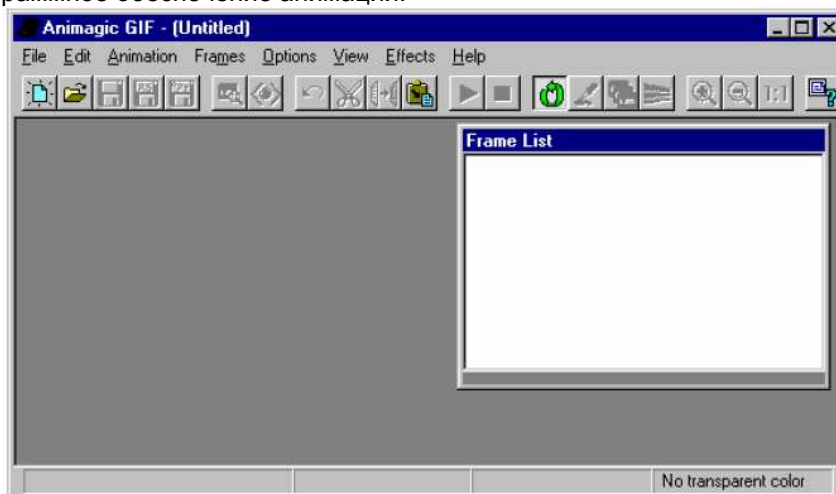
Важно при экспорте в .GIF файл, ChemSketch экспортирует всю страницу без взгляда на то, выбраны ли объекты или нет, поэтому удостоверьтесь, содержит ли страница только те объекты, которые Вы хотите видеть в .GIF файле.

2. В меню **File** (Файл) выберите **Export** (Экспорт) и выберите **GIF Bitmaps (.GIF)** (точечный рисунок GIF) как формат сохранения. Выберите название для файла, например BUTANE01.GIF
3. Щёлкните **OK**, изображение на этой странице будет сохранено.
4. Перейдите на следующую страницу, щёлкнув **Next Page** (Следующая страница)  на строке состояния или PAGE DOWN (Прокрутка содержимого документа или окна на одну страницу вниз) на Вашей клавиатуре.
5. Повторите шаги выше, сохраняя последовательно файлы каждый раз под незначительно различающимися именами BUTANE02.GIF, BUTANE03.GIF, BUTANE04.GIF или т.д.

4.5 Заключительная стадия: анимация

В зависимости от программного обеспечения анимации, интерфейс для ввода .GIF файлов может отличаться. Далее следует описание пакета программ Animagic программного обеспечения RTL³.

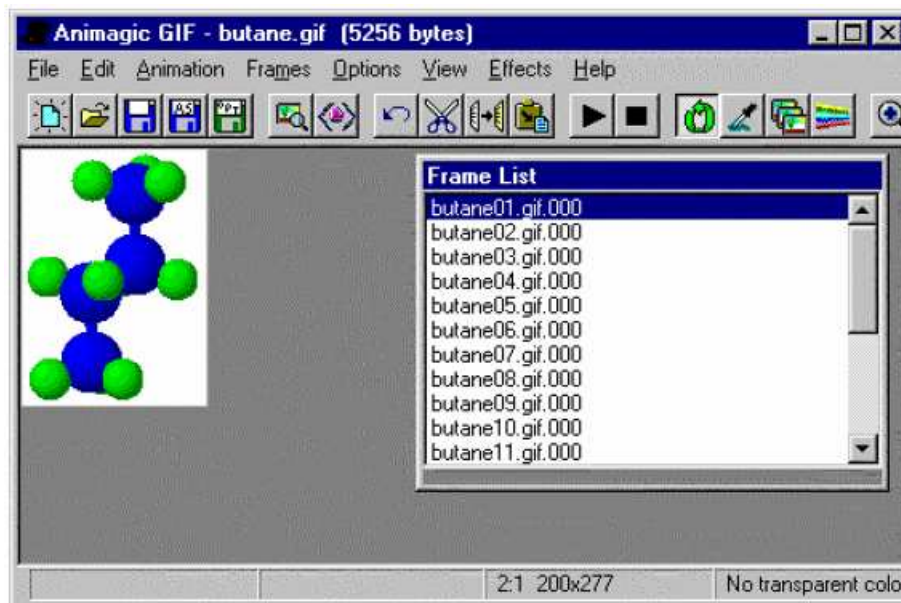
1. Откройте программное обеспечение анимации.





³ Это не является поддержкой программы.

анимации

2. Вставьте серию BUTANE0* ГИФ файлов в виде структур списка структуры. Например, в Animagic это можно сделать, используя операцию «Перетаскил и бросил» (drag-and-drop). Сделайте многократный выбор значков файлов из их папки (или из Windows Explorer) и перетащите их, пока они не окажутся на панели **Frame List**:



3. Щёлкните **Play** (Продвижение) , чтобы продвинуться по анимационным структурам как по структурам.
4. Щёлкните **Loop** (Цикл) , чтобы сделать движение бесконечно повторяющимся.
5. Если необходимо добавьте или удалите гифы, чтобы движение было совершенно гладким.
6. Вы можете испробовать и другие опции типа установки цветных масштабов, временных перерывов, грязно серых прямоугольников и т.д., увеличить или уменьшить анимацию ГИФ файла.
7. В меню **File** (Файл) выберите **Save Optimized As** (Сохранить оптимизирование как) и затем введите BUTANE.GIF.
8. Откройте этот файл в Вашей программе просмотра сети (Web), чтобы рассмотреть его. Вы можете открыть его, перетаскивая или вводя путь к файлу как URL - Uniform Resource Locator, Унифицированный указатель ресурса. Адрес информационного ресурса (файла) в сети Интернет.