



# Capitolul 1. Editoare de formule chimice

# 1.1. Editoare de formule chimice

## 1.1.1. Editoare de formule chimice - exemple

Editoarele de formule chimice - produse software utilizate în elaboarea, editarea și analiza structurilor chimice.

Nume	Producator	www	Disponibilitate
BIOVIA Draw	Dassault Systèmes Franta	<a href="http://www.3dsbiovia.com/products/collaborative-science/biovia-draw/draw-no-fee.php">http://www.3dsbiovia.com/products/collaborative-science/biovia-draw/draw-no-fee.php</a>	freeware
ACD/ChemSketch	ACD/Labs	<a href="https://www.acdlabs.com/resources/freeware/chemsketch/">https://www.acdlabs.com/resources/freeware/chemsketch/</a>	freeware
ChemDoodle	iChemLabs	<a href="https://www.chemdoodle.com/">https://www.chemdoodle.com/</a>	Free trial
ChemDraw	PerkinElmer	<a href="http://www.perkinelmer.com/product/chemdraw-professional-chemdrawpro">http://www.perkinelmer.com/product/chemdraw-professional-chemdrawpro</a>	Free trial
ICEdit	InfoChem	<a href="http://www.infochem.de/products/software/icedit.shtml">http://www.infochem.de/products/software/icedit.shtml</a>	Free trial
ChemWindow	Bio-Rad	<a href="http://www.bio-rad.com/en-ch/product/chemwindow-chemical-structure-drawing-software?ID=NCOPIM8UU">http://www.bio-rad.com/en-ch/product/chemwindow-chemical-structure-drawing-software?ID=NCOPIM8UU</a>	Free trial
HyperChem	Hypercube Inc.	<a href="http://www.hyper.com/">http://www.hyper.com/</a>	Free trial
MarvinSketch/View	ChemAxon	<a href="https://chemaxon.com/products/marvin">https://chemaxon.com/products/marvin</a>	freeware

# 1.1. Editoare de formule chimice

## 1.1.1. Editoare de formule chimice - exemple

Editoare online:

Nume	Producator	www
AngularDrawChem	Michał Malik	<a href="http://mmmalik.github.io/angular-draw-chem/#/editor">http://mmmalik.github.io/angular-draw-chem/#/editor</a>
ICEdit	InfoChem	<a href="http://www.infochem.de/products/software/icedit.shtml">http://www.infochem.de/products/software/icedit.shtml</a>
MolEdit	MolSoft	<a href="https://www.molsoft.com/servers.html">https://www.molsoft.com/servers.html</a>
MolView	Herman Bergwerf	<a href="http://molview.org/">http://molview.org/</a>
PubChem sketcher	PubChem	<a href="https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/edit2/index.html">https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/edit2/index.html</a>



## 1.1.2. ACD/Labs: Advanced Chemistry Development Labs

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

- ACD/Labs (1994) – o companie care dezvoltă și comercializează software specific pentru domeniile chimic, biochimic și farmaceutic.
- Produsele create vizează (<https://www.acdlabs.com/products/>):
  - ✓ creșterea acurateții de prelucrare și interpretare a datelor analitice (tehnici de analiză: RMN, SM, GC, IR, UV, LC);
  - ✓ desenarea de structuri chimice - **ACD/ChemSketch**;
  - ✓ generarea de denumiri în concordanță cu nomenclatura IUPAC (International Union of Pure and Applied Chemistry) și CAS (Chemical Abstracts Service) - **ACD/Name**;
  - ✓ oferirea de baze de date;
  - ✓ estimarea proprietăților fizico-chimice - **ACD/Labs Percepta Profilers**.
- Versiunea gratuită (freeware) nu include toate facilitățile celei comerciale.

## 1.1.3. ACD/ChemSketch

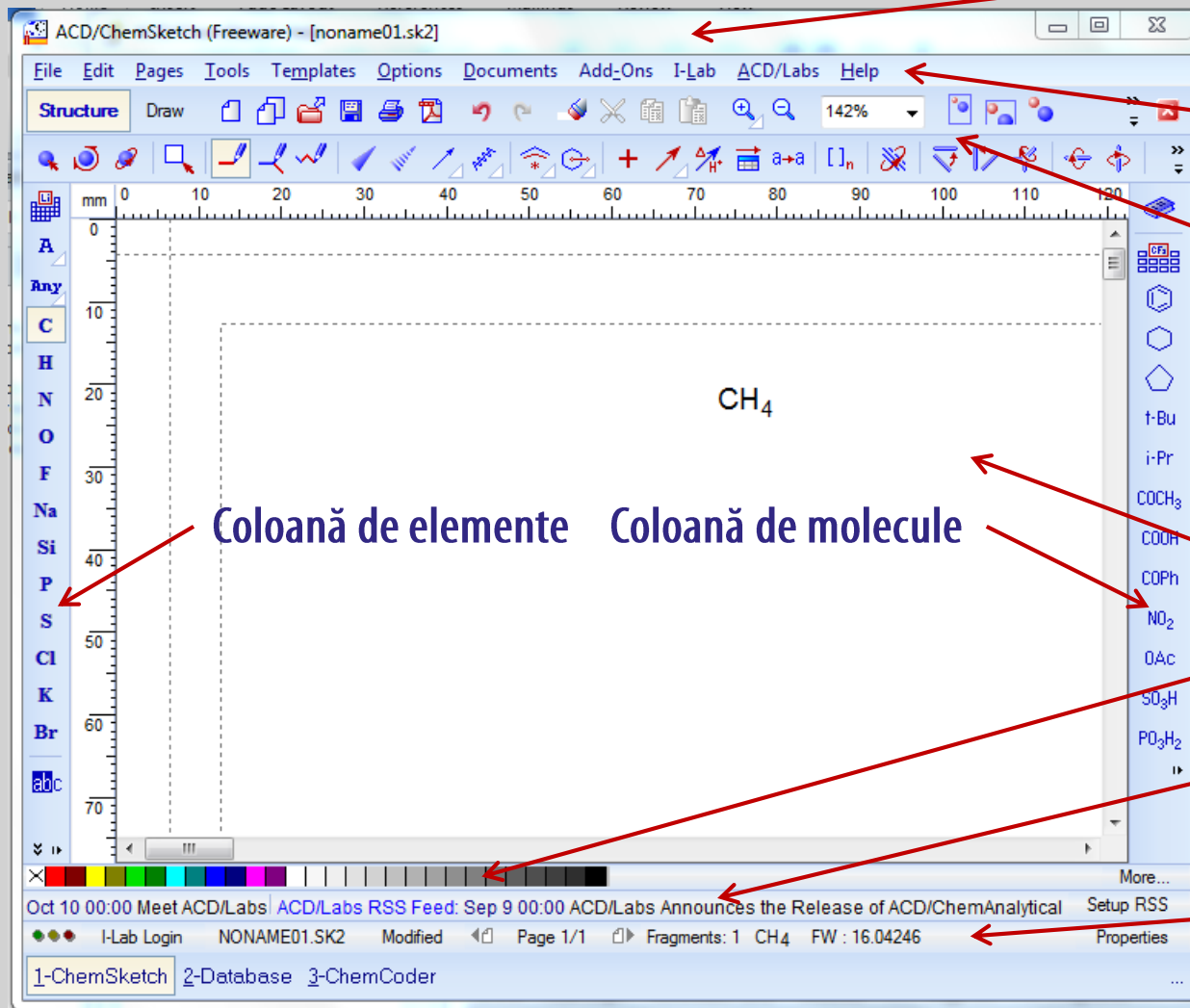
- ACD/ChemSketch este o interfață inteligentă pentru desenarea structurilor chimice (inclusiv compuși organici, organometalici, polimeri, etc.)
- Gratuită pentru instituții de învățământ superior și studenți.
- Facilități oferite de soft:
  - Generează structuri, reacții și scheme chimice;
  - Generează denumirile IUPAC pentru molecule de până la 50 de atomi și 3 structuri inelare;
  - Calculează proprietățile moleculare ale structurilor (masă moleculară, densitate, coeficientul de partiție octanol/apă);
  - Vizualizarea tridimensională (3D) a structurilor chimice cu posibilități de rotire a lor;
  - Permite importul și exportul fișierelor într-o multitudine de formate.
- Versiunea gratuită (freeware) nu include toate facilitățile celei comerciale.

# ACD/ChemSketch

A Complete Software Drawing Package for R&D



## Descriere generală a interfeței:



Bara de titlu

Bara de meniu

Bara de instrumente

Coloană de elemente    Coloană de molecule

Spațiul de lucru

Bara de culori

Bara cu ultimele informații  
despre ACD

Bara de stare



## Descriere generală a interfeței:

**Selectare**

**Selectarea altui element din tabelul periodic**

**Alegerea săgeților**

**Modificarea modului de apariție a legăturilor**

**Element chimic**

**Buton de scriere**

**Coloană de molecule**

**Modificarea poziției: -CH<sub>3</sub> sau H<sub>3</sub>C-**

ACD/ChemSketch (Freeware) - [noname01.sk2]

File Edit Pages Tools Templates Options Documents Add\_Ons I-Lab ACD/Labs Help

Structure Draw

mm 0 10 20 30 40 50 60 70 80 90 100 110 120

A  
Any  
C  
H  
N  
O  
F  
Na  
Si  
P  
S  
Cl  
K  
Br  
abc

CH<sub>4</sub>

t-Bu  
i-Pr  
COCH<sub>3</sub>  
COOH  
COPh  
NO<sub>2</sub>  
OAc  
SO<sub>3</sub>H  
PO<sub>3</sub>H<sub>2</sub>

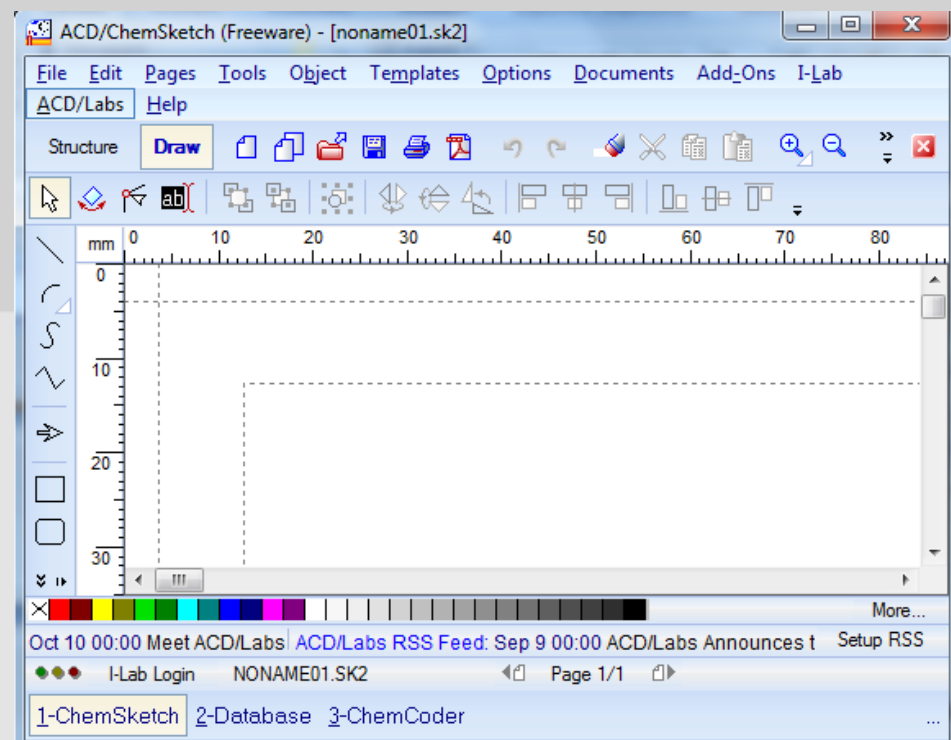
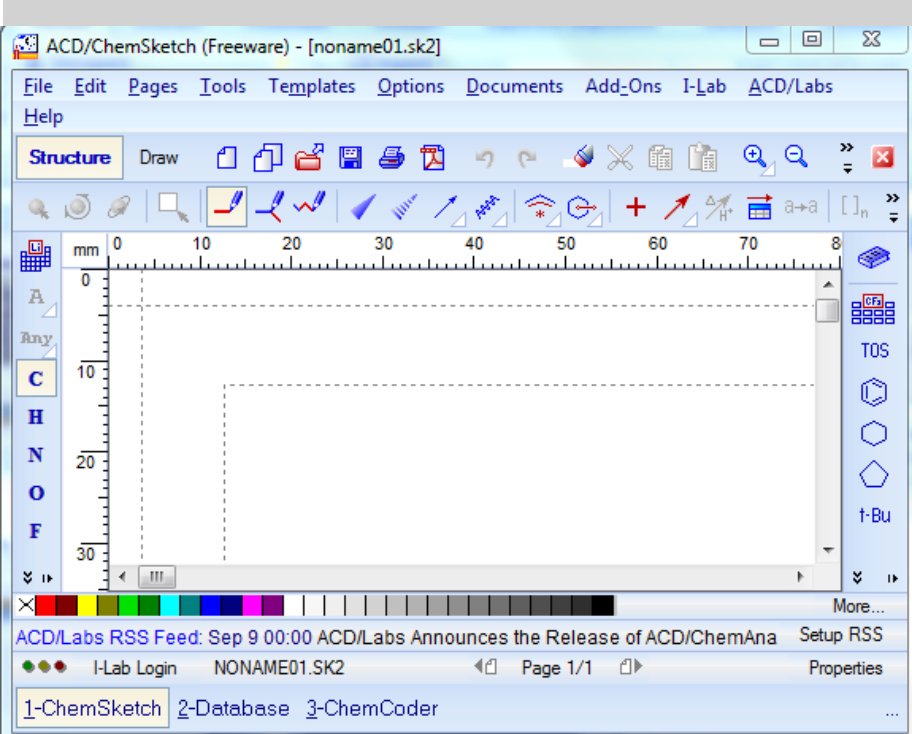
Oct 10 00:00 Meet ACD/Labs ACD/Labs RSS Feed: Sep 9 00:00 ACD/Labs Announces the Release of ACD/ChemAnalytical Setup RSS

I-Lab Login NONAME01.SK2 Modified Page 1/1 Fragments: 1 CH<sub>4</sub> FW : 16.04246 Properties

1-ChemSketch 2-Database 3-ChemCoder



## Moduri de lucru: **Structure** și **Draw**.



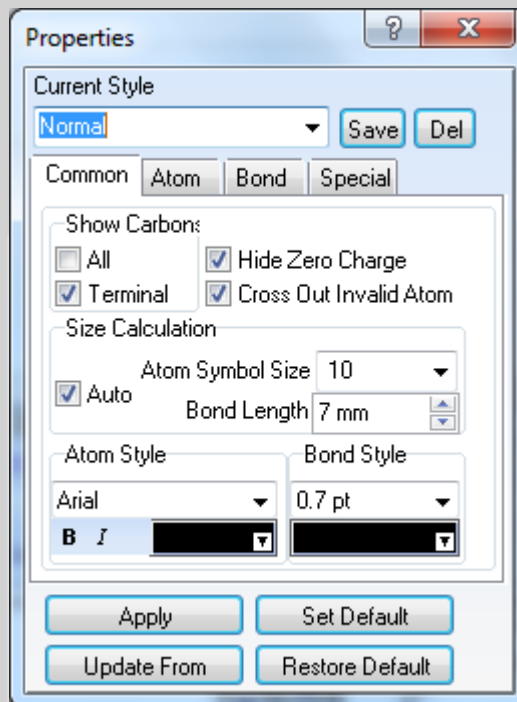
În ambele moduri, există casete de dialog derulante în care se fac alegeri stilistice: tipul de font, grosimea liniei, tipul de linie, etc.

Dacă vă poziționați cu mouse-ul pe un buton din bara de instrumente, automat va apărea o casetă cu funcția butonului.

## Instrumentele pentru cele două moduri de lucru

### Modul Structure:

Tools → Structure Properties: permite modificări de stil (dimensiune, tip caracter, culoare) atât pentru atomi cât și pentru legături



## Modul Draw:

Tools → Pen Style Panel

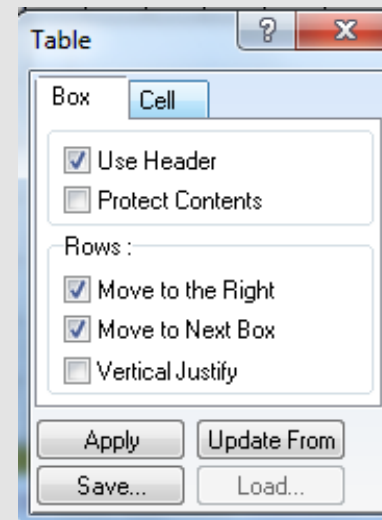
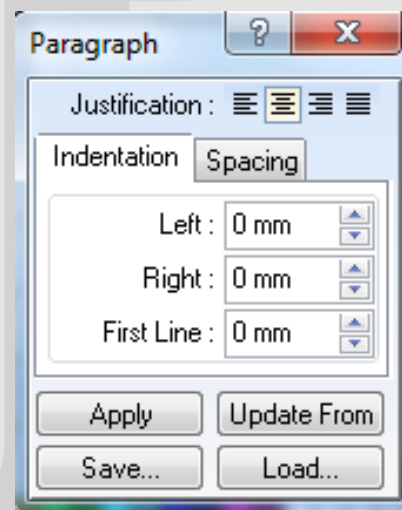
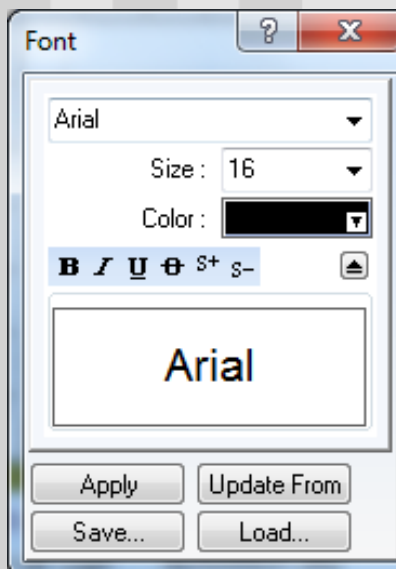
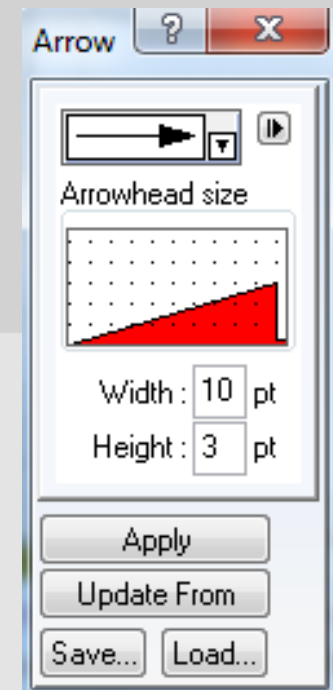
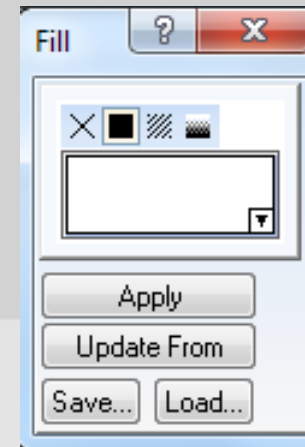
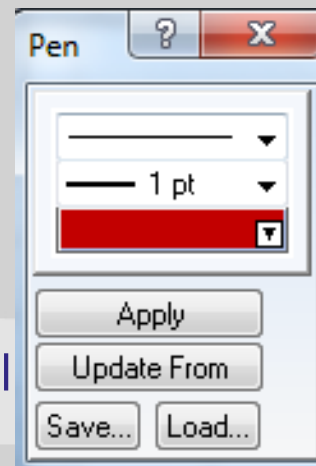
Tools → Fill Style Panel

Tools → Arrow Style Panel

Tools → Font Style Panel

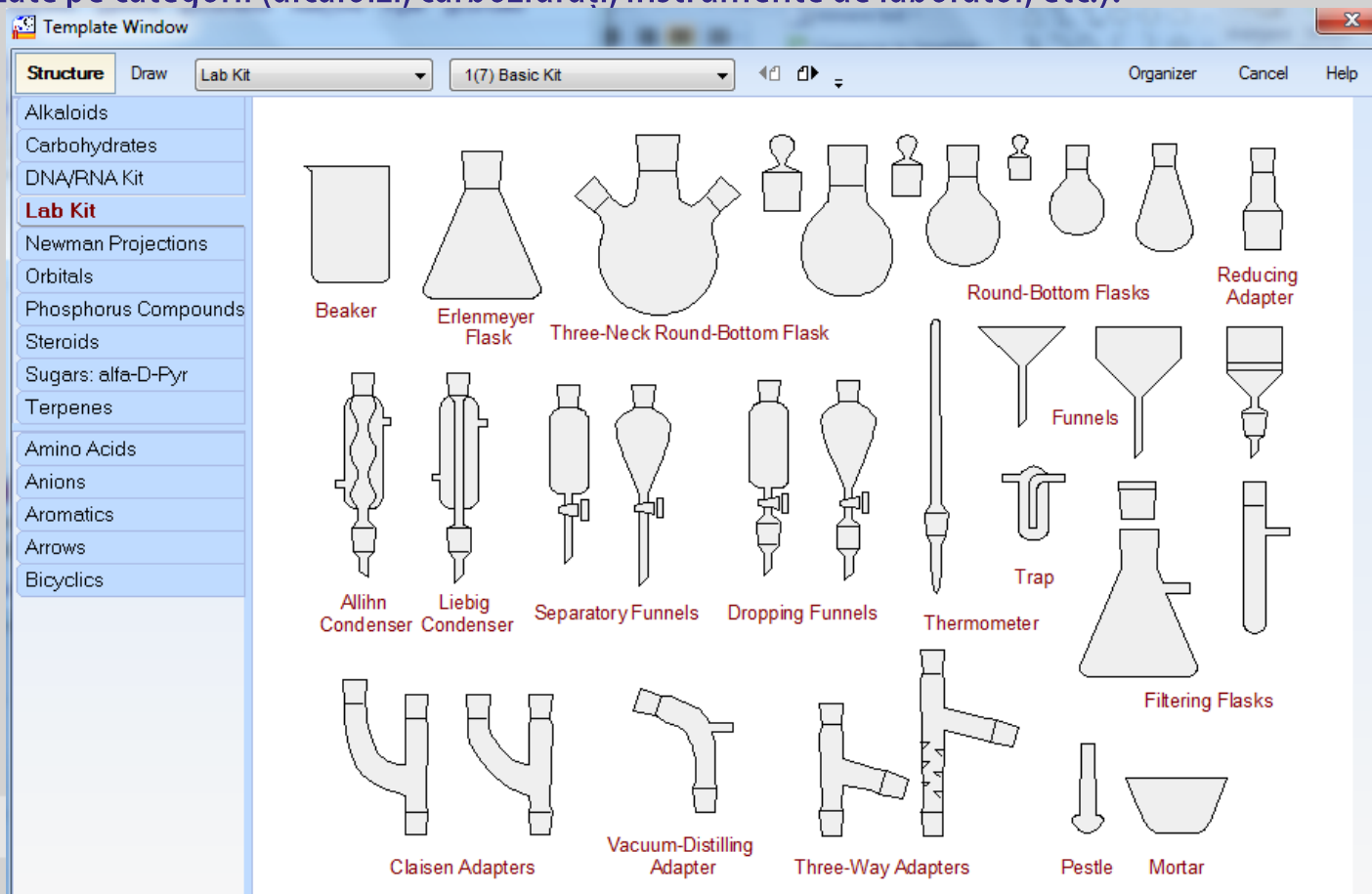
Tools → Paragraph Style Panel

Tools → Table Style Panel



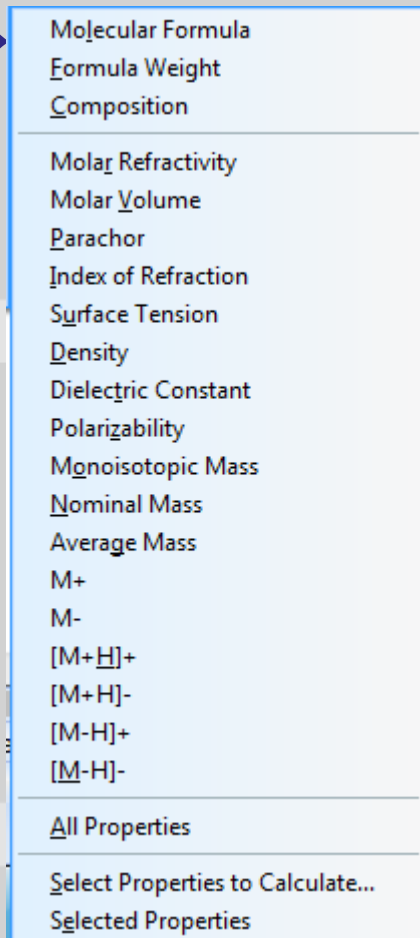
## Templates

-Directorul Templates (Șabloane) conține o colecție de structuri chimice și figuri gata desenate, organizate pe categorii (alcaloizi, carbohidrați, instrumente de laborator, etc.).



## Caracteristici suplimentare

- Tools → Check Tautomeric Form
- Tools → Generate → Name for Structure
- Tools → Calculate →

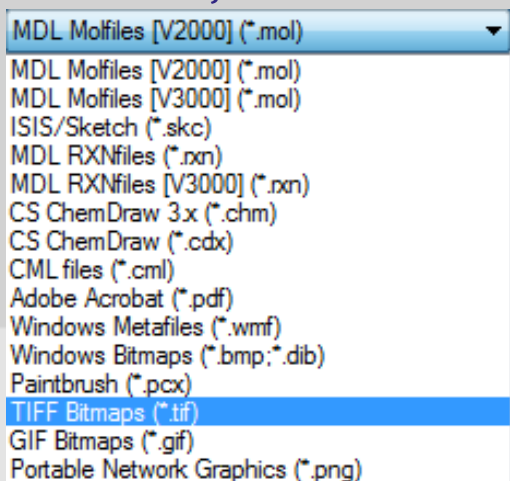


permite calculul diferitor proprietăți ale formulei selectate

- Add-Ons → Search Pub Chem
- Add-Ons → Search eMolecules
- Add-Ons → Search ChemSpider

## Salvarea fișierelor

- Implicit extensia este .sk2
- pentru a putea fi deschise și cu alte software-uri, ChemSketch permite salvarea cu diverse extensii:



## ChemSketch 3D

- permite vizualizarea tridimensională a structurilor chimice create.
- pentru vizualizare 3D se selectează structura dorită, se realizează comanda Tools → 3D Structure Optimization și apoi se activează butonul 3D Viewer.



Vizualizarea 3D se poate realiza în următoarele moduri:

Command	Button
<u>Wireframe</u>	
<u>Sticks</u>	
<u>Balls &amp; Sticks</u>	
<u>Dots Only</u>	
<u>Disks</u>	
<u>Spacefill</u>	
<u>With Dots</u>	