

Документ подписан простой электронной подписью  
Информация о владельце:  
ФИО: Локтионова Оксана Геннадьевна  
Должность: проректор по учебной работе  
Дата подписания: 06.12.2023 11:42:43  
Уникальный программный ключ:  
0b817ca911e6668abb13a5d426d39e5f1c11eabbf73e943df4a4851fda56d089

**МИНОБРНАУКИ РОССИИ**  
**Федеральное государственное бюджетное образовательное**  
**учреждение высшего образования**  
**«Юго-Западный государственный университет»**  
**(ЮЗГУ)**

**Кафедра фундаментальной химии и химической технологии**



**РАБОТА С РЕДАКТОРОМ ВКСЧЕМ**

Методические указания по выполнению  
практической и самостоятельной работы  
для студентов направления подготовки 04.04.01

Курск 2023

УДК 547.1

Составитель: А.В. Лысенко

*Рецензент*

*Кандидат химических наук, доцент Е.А. Фатьянова*

**Работа с редактором ВКChem:** методические указания по выполнению практической и самостоятельной работы для студентов направления подготовки 04.04.01/ Юго-Зап. гос. ун-т; сост.: А.В. Лысенко. Курск, 2023, 16 с.

Методические указания по выполнению практической работы «Работа в химическом редакторе ВКChem» предназначены для изучения дисциплины «Компьютерные технологии в химии».

Содержат описание программы и интерфейса, основные функции ВКChem, а также достоинства и недостатки данной программы. Представлены практические задания, которые позволяют, используя возможности редактора, изобразить схемы синтезов и реакций.

Методические указания соответствуют требованиям Федерального государственного образовательного стандарта высшего профессионального образования и учебному плану направления подготовки 04.04.01 Химия, квалификация – магистр.

Текст печатается в авторской редакции

Подписано в печать . Формат 60x84 1/16.

Усл.печ. л. 0,93. Уч.-изд. л. 0,84.

Тираж 100 экз. Заказ . Бесплатно.

Юго-Западный государственный университет.

305040, г. Курск, ул. 50 лет Октября, 94.

## Практическая работа

### «Работа в химическом редакторе VKChem»

**Цель работы:** освоить векторный графический редактор, позволяющий вручную создавать схематическое представление химических соединений. Используя возможности редактора изобразить схемы синтезов и реакций

### Теоретические сведения

Химическое программное обеспечение - компьютерные программы, используемые в области химии.

Для работы с химическими документами в большинстве случаев невозможно использовать только текстовые или графические редакторы общего назначения. Редактирование текстов, содержащих химическую информацию, требует использования специализированных программных инструментов.

Общий подход к созданию интерфейса химических редакторов заключается в том, что химические формулы собираются по принципу конструктора из структурных элементов (ароматические кольца, символы химической связи, стрелки и т.п.). Формула и отдельные её фрагменты могут быть модифицированы (вставка необходимых символов, изменение размера или ориентации на плоскости).

Как правило, химические редакторы снабжаются комплектами заготовок сложных формул и рисунков(шаблонов), наиболее часто употребляемых в работе (аминокислоты, пептиды, углеводы, стереоизомеры, нуклеотиды, лабораторное оборудование). Многие снабжены модулями по именованию соединений в соответствии с номенклатурой.

Химические редакторы позволяют выполнять следующие функции:

- создавать на экране химические структурные формулы, схемы реакций, лабораторные установки;
- конструировать объемные молекулярные модели и выполнять манипуляции с ними (увеличение или уменьшение моделей, вращение и перемещение их и т.д.);

- рассчитывать энергетические и пространственные параметры системы (распределение электронной плотности, энергию и длину связей, валентные углы и т.п.);
- рассчитывать энергию молекулы в стационарном и возбужденных состояниях на основе классической механической модели осциллирующих атомов;
- рассчитывать другие молекулярные характеристики и вероятность пути прохождения химических реакций.

### **Описание программы**

VKChem - бесплатный химический редактор от разработчика Beda Kosata, в настоящее время поддерживаемый Reinis Danne.

VKChem - специализированный Python / Tk (*Tcl*) векторный графический редактор позволяющий вручную создавать схематическое представление химических соединений, которые образуют определённое вещество.

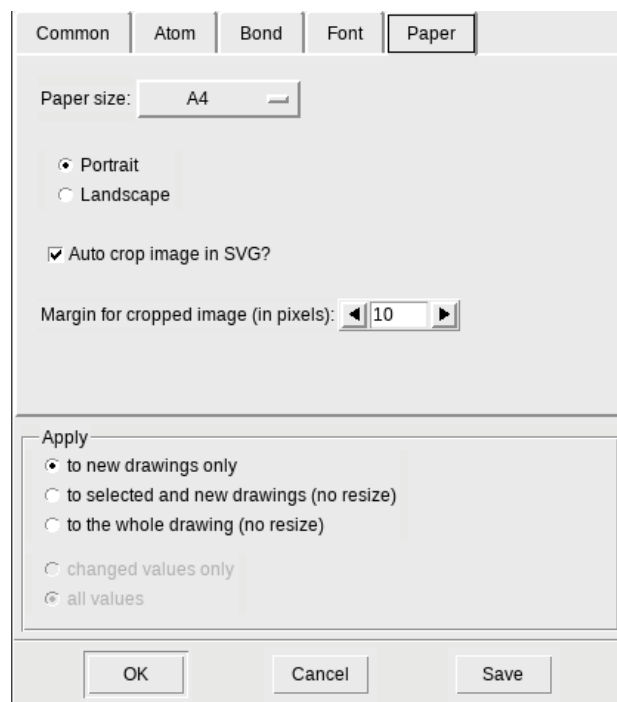
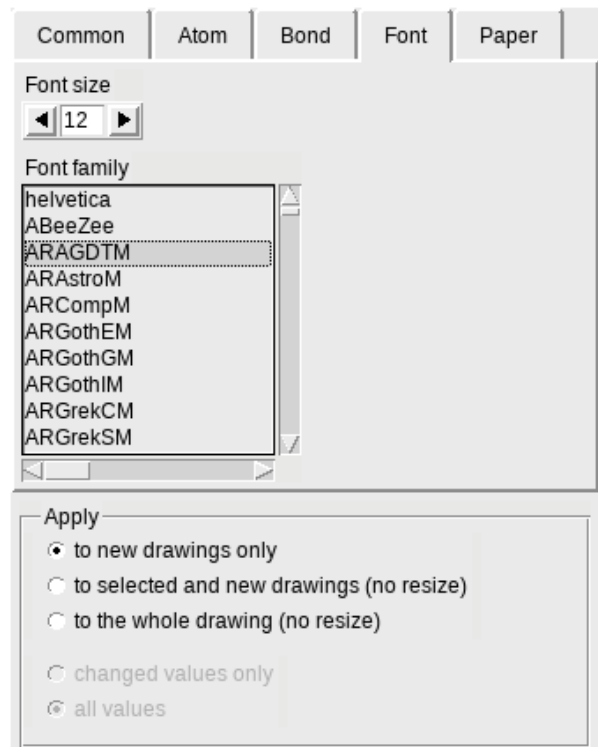
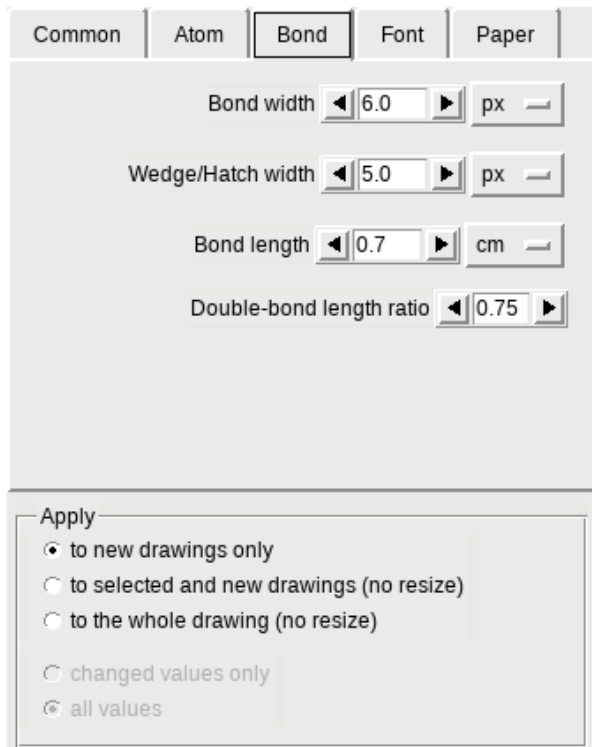
The image displays two screenshots of a software dialog box titled "Standard values".

**Top Screenshot:**

- Tab: Common
- Section: Line
  - Line width: 1.0 px
- Section: Color
  - Line color: [Black swatch]
  - Area color: [Grey swatch]
  - Line color:  Transparent
  - Area color:  Transparent
- Section: Apply
  - to new drawings only
  - to selected and new drawings (no resize)
  - to the whole drawing (no resize)
  - changed values only
  - all values
- Buttons: OK, Cancel, Save

**Bottom Screenshot:**

- Tab: Atom
- Option:  Show hydrogens on visible atoms
- Section: Apply
  - to new drawings only
  - to selected and new drawings (no resize)
  - to the whole drawing (no resize)
  - changed values only
  - all values
- Buttons: OK, Cancel, Save



Программа написана на языке программирования python, что говорит о поддержке на различных платформах, которые поддерживают Python. Была разработана под GNU / Linux и успешно портирована на WinXP и MacOS X.

На момент подготовки методических указаний актуальная версия программы - 0.14.0. Разработка окончилась в 2010 году.

## Интерфейс BKChem

Запуская редактор впервые, нас встречает стандартное рабочее пространство (рис.1). Большую часть занимает лист для редактирования, вверху располагается панель инструментов.

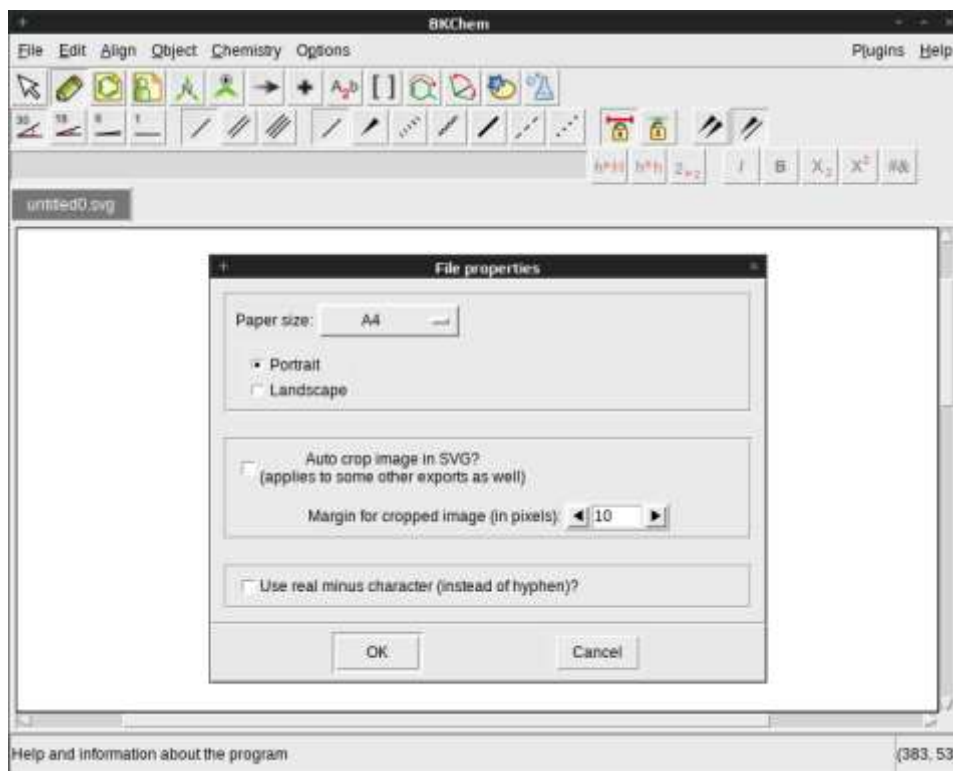
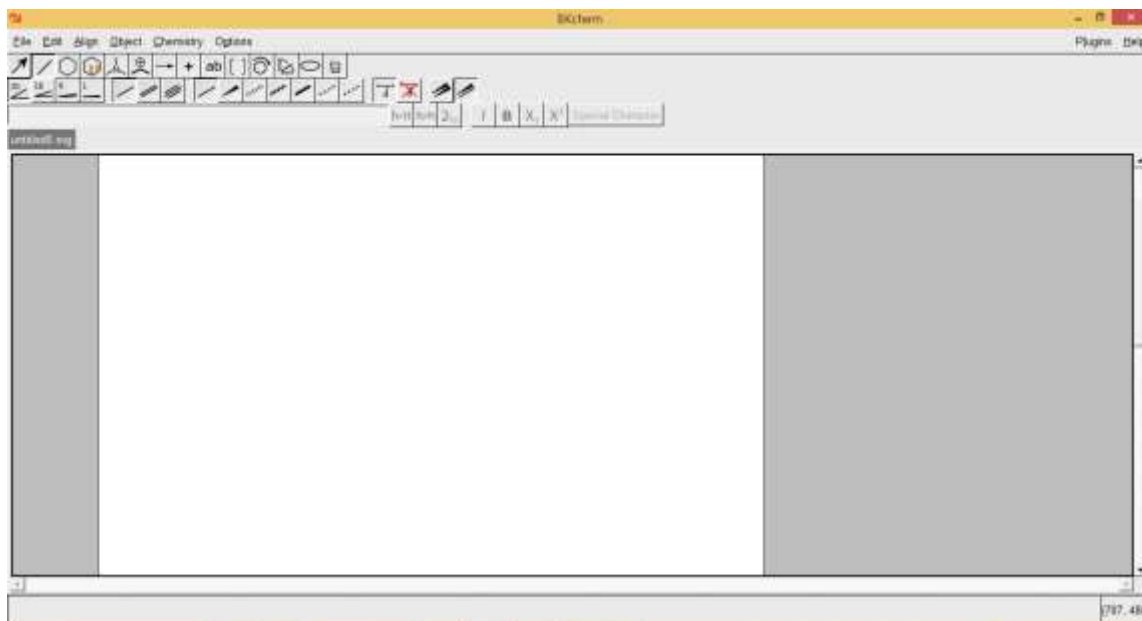
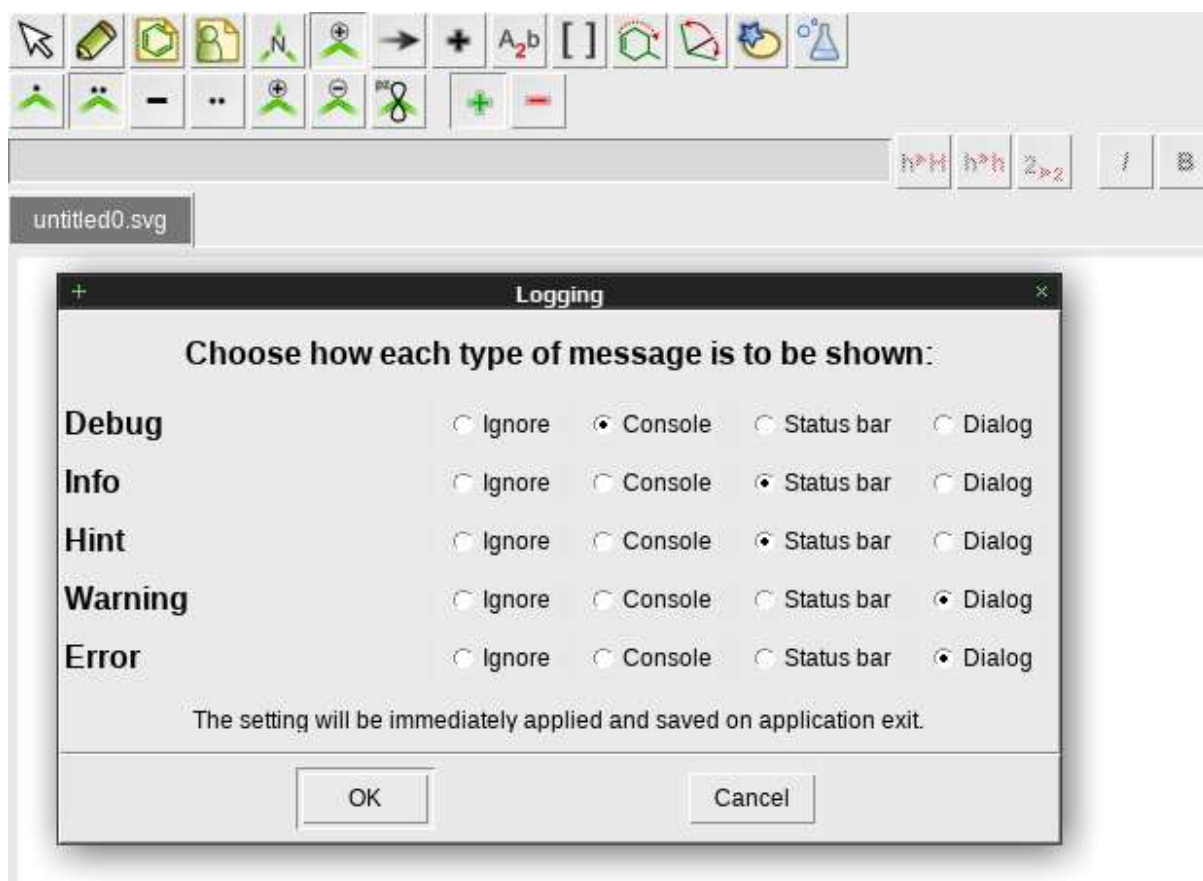


Рисунок 1 - Интерфейс

## Основные функции ВКChem

С помощью ВКChem рисовать схемы соединений очень легко, благодаря рисованию от звена к звену (*поузловое рисование*), а также ограничениям их протяженности и углу наклона. Поддерживается простая векторная графика (*прямоугольники, круги, многоугольники и прочее*), стрелки (*нескольких типов*), имеется настройка шрифта и цветов, есть возможность использования линейных формул, зарядов и радикалов (рис.2).





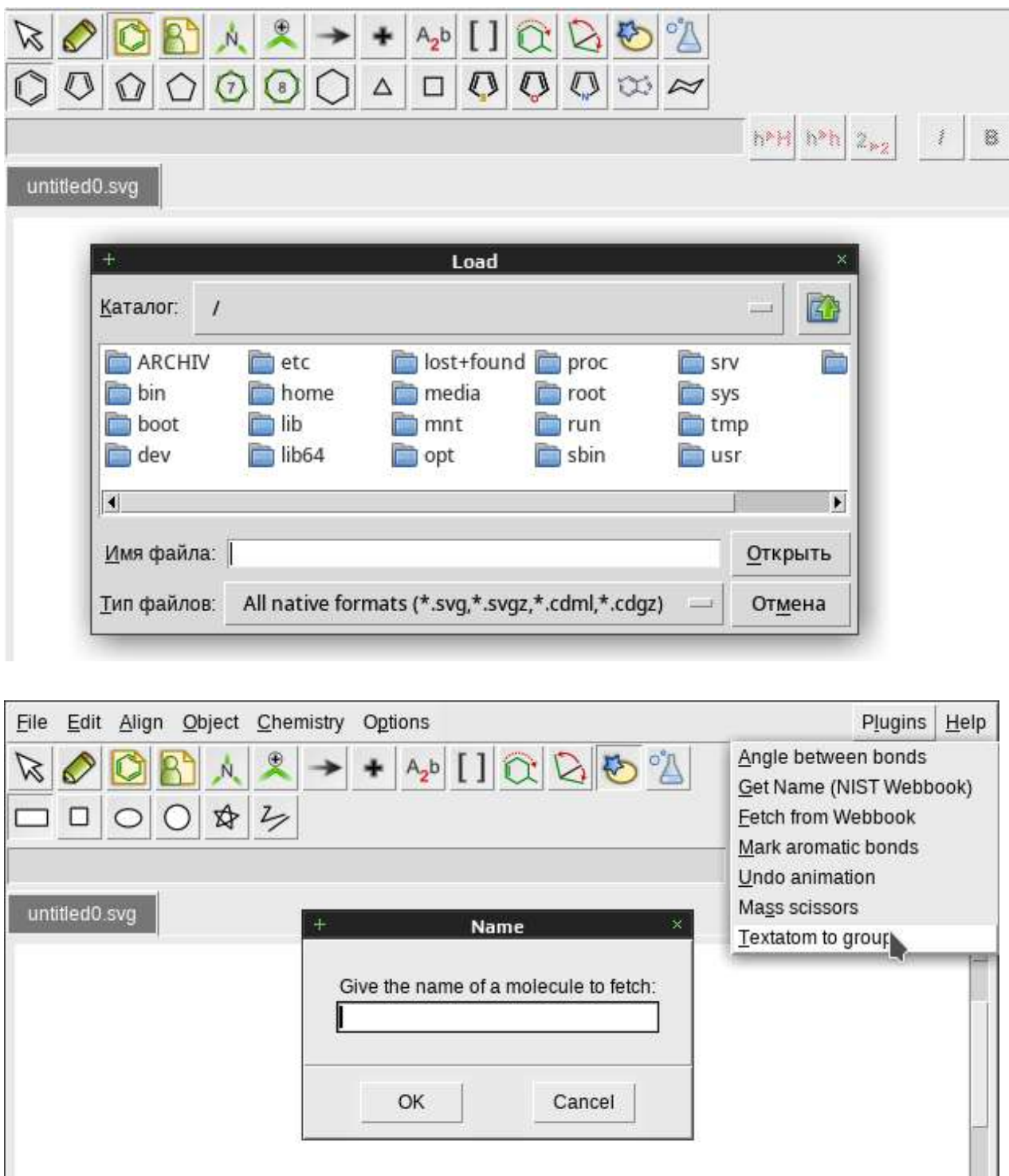
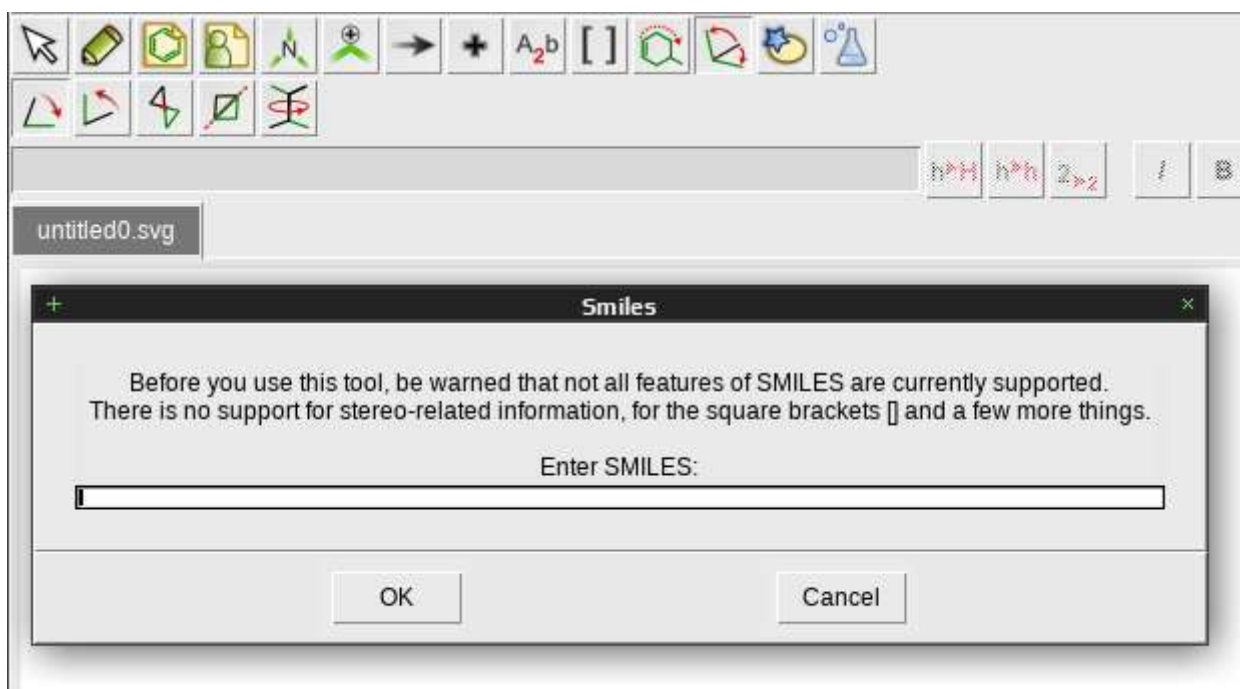
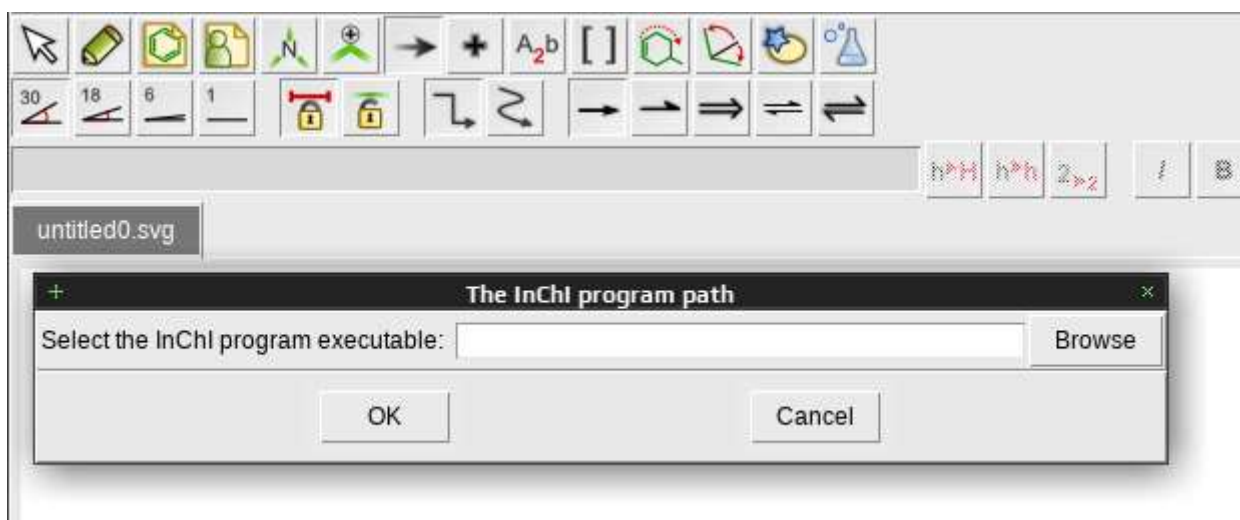
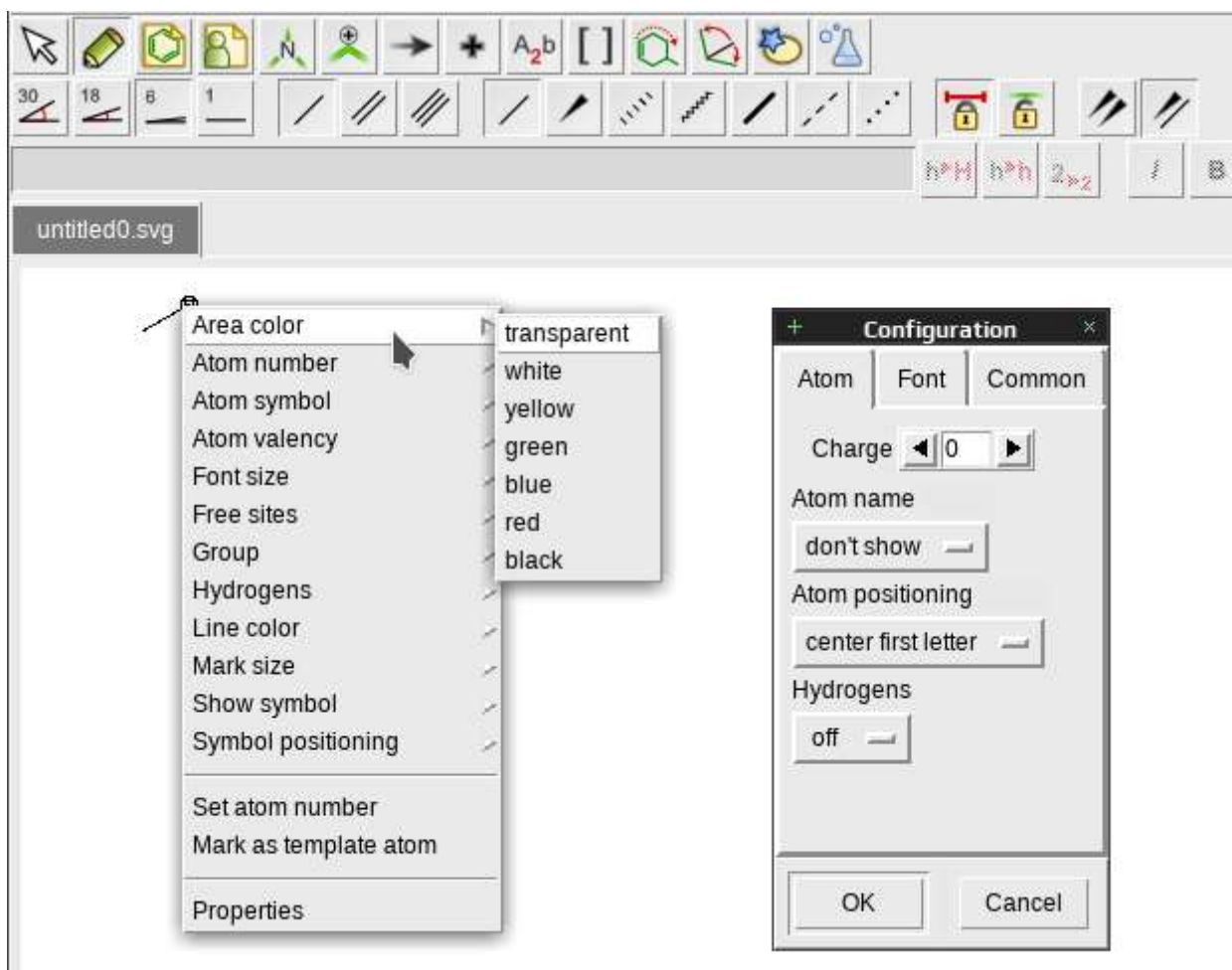


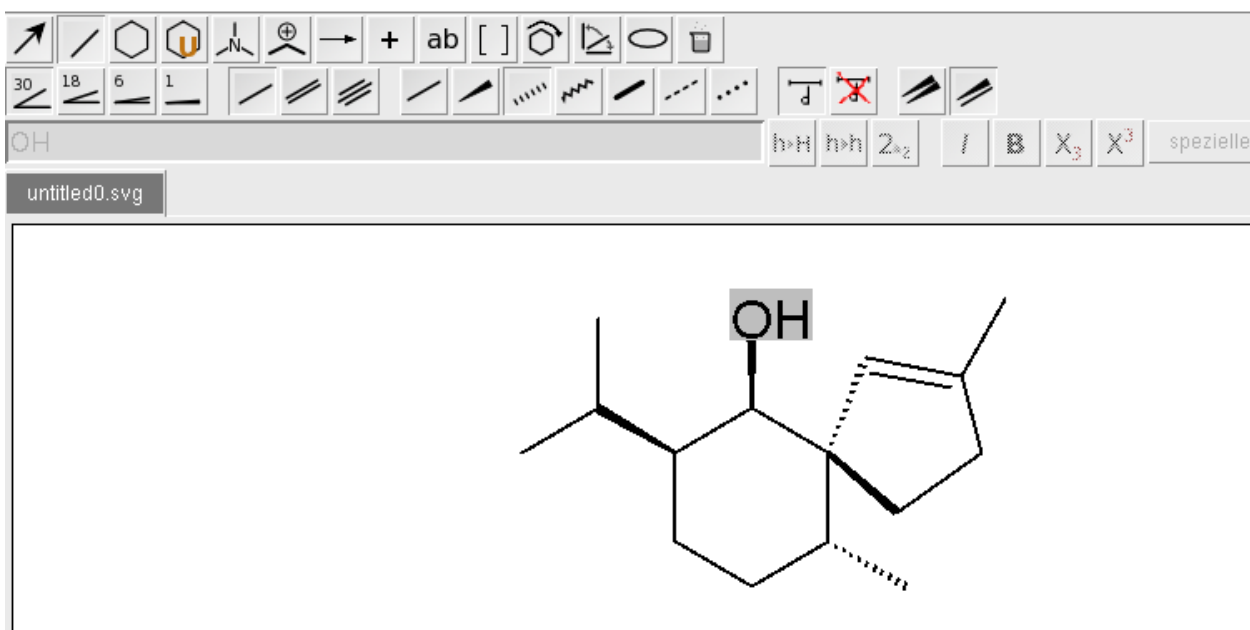
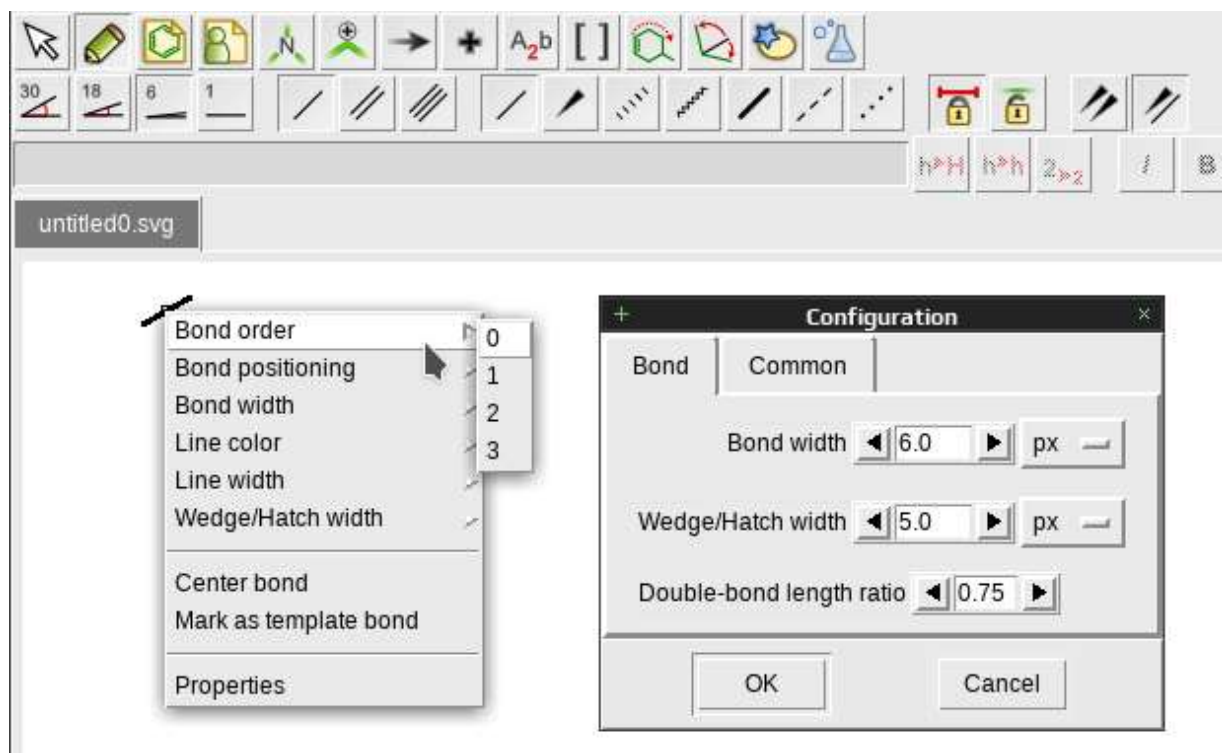
Рисунок 2 - Панель инструментов

ВКChem содержит наборы шаблонов (*моделей*) значительно упрощающее процесс рисования, так как нет необходимости рисовать каждое отдельное соединение вручную. Имеются модели для бензола, пурина, цикlopентадиена, цикlopентана и циклогептана.





VKChem имеет неограниченную функцию повтора и отмены внесённых изменений, поддерживается выравнивание, 2D и 3D вращение, масштабирование и многое другое. Промежуточный результат, сеанс рисования схемы соединений, можно сохранить в собственном формате основанном на **XML** (*расширяемый язык разметки*).



Созданные модели VKChem можно экспортировать (рис. 3) во множество форматов, поддерживаются SVG, ODF (*OpenOffice 2.0*), PDF, PNG, CML и CML2, OpenOffice Draw (*LibreOffice Draw*), Molfes, SMILES, Encapsulated PostScript и INChI (*опционально*).

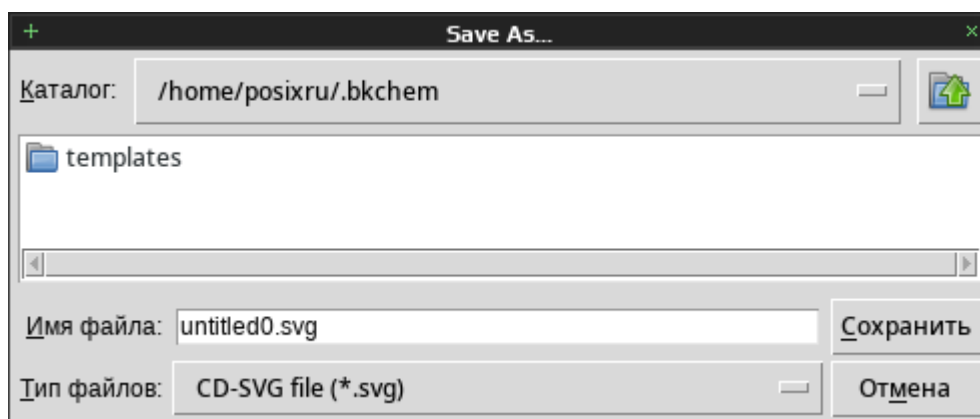
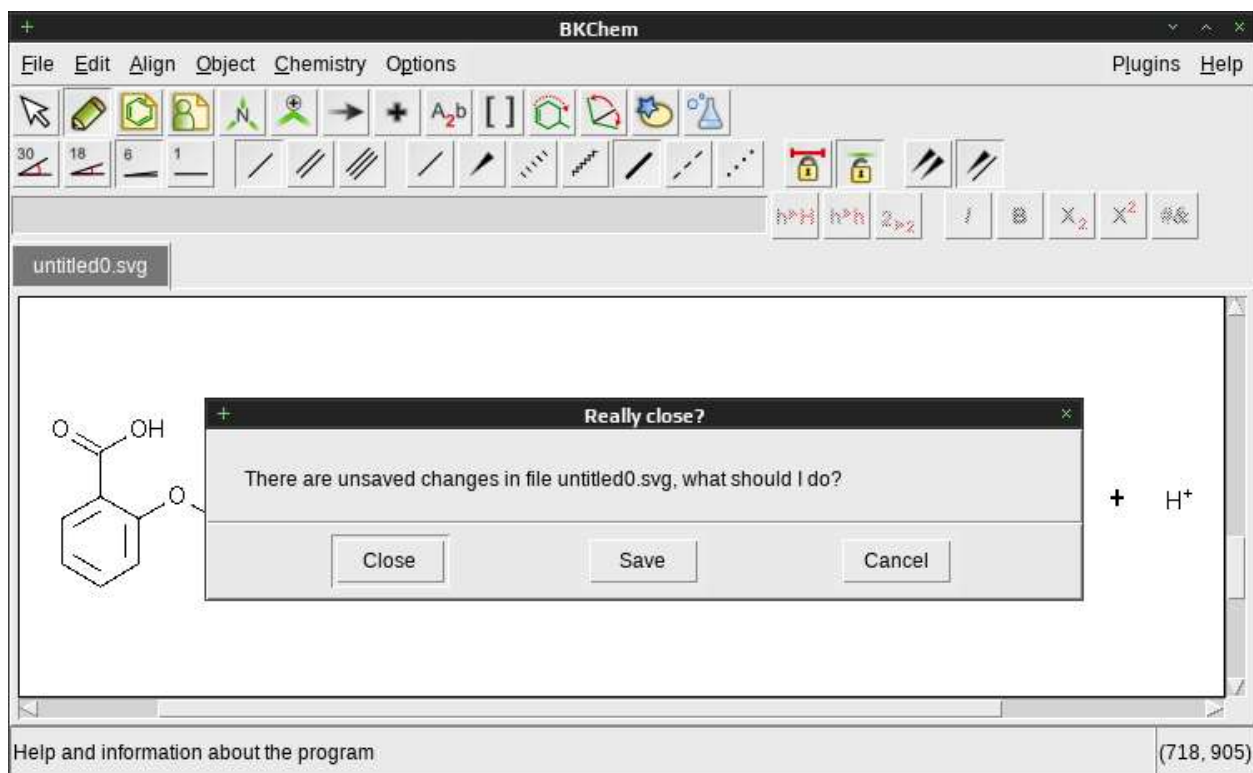


Рисунок 3 - Экспортирование созданных моделей BKChem

Поддерживается проверка достоверности нарисованных моделей, добавление пользовательских плагинов и сценариев. Поддерживает импорт: Molfile, SMILES, InChI.

## Достоинства и недостатки ВКChem

К основным достоинствам ВКChem можно отнести:

- минималистичный интерфейс, который отличает от других программ подобного рода

- поддержка на многих платформах
- поддержка большого числа форматов
- малый размер и системные требования

ВКChem имеет и ряд недостатков:

- нельзя поставить сетку
- не работают горячие клавиши на русской раскладке
- нет русификации
- малый набор функций для углубленного проектирования химических процессов

Данная программа подойдет для людей, начинающих работать с моделями органических соединений, чтобы усвоить основные навыки редактирования и ознакомиться с рабочим пространством. А также для пользователей, чьи системные требования не позволяют установить более ресурсоемкое ПО.

## Практическое задание

1. Используя возможности редактора изобразить схемы синтезов и реакций согласно варианту таблицы 1.
2. Все соединения назовите;
3. Изобразите механизм **выделенной жирным шрифтом** реакции.

*Примечание:* в ходе выполнения работы, для изображения гетероциклических соединений, пользуйтесь шаблонами и функцией рисования от «звена к звену».

Таблица 1 – Вариант и номер реакции

№ варианта	Номера реакций	№ варианта	Номера реакций
1	1, 16, 61	16	31, 46, 62
2	2, 17, 63	17	32, 47, 64
3	3, 18, 65	18	33, 48, 66
4	4, 19, 67	19	34, 49, 68
5	5, 20, 69	20	35, 50, 70
6	6, 21, 71	21	36, 51, 72
7	7, 22, 73	22	37, 52, 74
8	8, 23, 75	23	38, 53, 76
9	9, 24, 77	24	39, 54, 78
10	10, 25, 51	25	40, 55, 62
11	11, 26, 52	26	41, 56, 63
12	12, 27, 53	27	42, 57, 64
13	13, 28, 54	28	43, 58, 65
14	14, 29, 55	29	44, 59, 66
15	15, 30, 56	30	45, 60, 67

#### Наименование реакций:

1. Ацилирование бензола по Фриделю-Крафтсу
2. Декарбоксилирование Бартона
3. Конденсация Кляйзена
4. Метод Гриньяра
5. Метод Зелинского и Казанского
6. Окисление по Байеру - Виллигеру
7. Перегруппировка Амадори
8. Перегруппировка Бамбергера
9. Перегруппировка Брука
10. Получение гомолога бензола по реакции Вюрца-Фиттига
11. Правило Зайцева
12. Правило Марковникова
13. Процесс Фишера - Тропша
14. Реакции Ганча
15. Реакция Аллана - Робинсона
16. Реакция Анджели - Римини
17. Реакция Анри

18. Реакция Аппеля
19. Реакция Арндта - Эйстера
20. Реакция Ауверса
21. Реакция Барджеллини
22. Реакция Бартона
23. Реакция Белоусова - Жаботинского
24. Реакция Бернтсена
25. Реакция Бёрча
26. Реакция Бородина - Хунсдикера
27. Реакция Бриггса - Раушера
28. Реакция Буво - Блана
29. Реакция Бутлерова
30. Реакция Вагнера
31. Реакция Вильсмейера - Хаака
32. Реакция Вильсмейера.
33. Реакция Виттига
34. Реакция Вюрца
35. Реакция Гарриеса
36. Реакция Глазера
37. Реакция Густавсона
38. Реакция Дильса - Альдера
39. Реакция Зандмейера
40. Реакция Зелинского
41. Реакция Зинина
42. Реакция Канниццаро
43. Реакция Кастро - Стефенса
44. Реакция Кижнера - Вольфа
45. Реакция Клемменсена
46. Реакция Кнёвенагеля
47. Реакция Кольбе
48. Реакция Кольбе - Шмидта
49. Реакция Коновалова
50. Реакция Кори - Хауса
51. Реакция Криге
52. Реакция Кулинковича
53. Реакция Кучерова
54. Реакция Лебедева



55. Реакция Манниха
56. Реакция Меншуткина
57. Реакция Михаэля
58. Реакция Мицунобу
59. Реакция Перкина
60. Реакция Петрова - Кормера
61. Реакция Поварова
62. Реакция Раймера-Тимана
63. Реакция Розенмунда - Зайцева
64. Реакция Сергеева – Удрисома – Кружалова
65. Реакция Стилле
66. Реакция Сузуки
67. Реакция Торпа
68. Реакция Трофимова
69. Реакция Фаворского
70. Реакция Фаворского - Реппе
71. Реакция Фаворского.
72. Реакция Фриделя - Крафтса
73. Реакция Хека
74. Реакция Ходкевича - Кадио
75. Реакция Хорнера
76. Реакция Штаудингера
77. Синтез Байера - Древсена
78. Синтез Пааля-Кнора