ორგანზომილებიანი მოლეკულური მოდელების (სტრუქტურული ფორმულების) აგება

ქიმიური ტექსტების (წიგნები, სტატიები, სასტენდო მასალები, ბუკლეტები და სხვა) გაფორმებისას ხშირად წარმოიშობა ორგანზომილებიანი ქიმიური სტრუქტურების აგების საჭიროება. როგორ წარმოგვიდგენია ვიტამინ B12-ის სტრუქტურული ფორმულის "დახატვა"? ეს მარტო კომპიუტერის ჩვეულებრივი მომხმარებლისთვის კი არა, ისეთ გრაფიკულ პროგრამებში გაწაფული ოპერატორისთვისაც კი დიდი თავსატეხია, როგორიცაა Corel, Photoshop და მისთ.

ამ ამოცანის შესასრულებლად შექმნილია ორგანზომილებიანი ქიმიური გრაფიკის არაერთი პროგრამა, რომელთაგანაც ყველაზე დიდი პოპულარობით სარგებლობს ChemDraw, ChemSketch, ChemWindow და ISIS Draw. მათი საშუალებით წარმოებს ორგანზომილებიანი ქიმიური სტრუქტურების აგება და ტრანსფორმაციები.

ჩამოთვლილი პროგრამების ინტერფეისი და მოქმედების მეთოდი მნიშვნელოვნად განსხვავდება ერთმანეთისგან, თუმცა ისინი ერთ საერთო პრინციპზეა აგებული. მათი დანიშნულებაა ქიმიური სტუქტურების აგება მზა ქიმიური ელემენტებით (მოწყობილობებით). ამისთვის ყველა პროგრამას აქვს ისეთი მზა ელემენტები, როგორიცაა ქიმიური ბმა, ქიმიური ელემენტების ცხრილი (საიდანაც შესაძლებელია ელემენტის არჩევა) და მოლეკულების ფრაგმენტებისა და რადიკალების ბაზა. ქიმიური გრაფიკული პროგრამები კლასიკური გრაფიკული პროგრამებისგან (PhotoShop, Corel Draw) "ქიმიის ცოდნითაც" გამოირჩევა. მათ მიერ აგებული სტრუქტურები არ არის გეომეტრიული ფიგურები ან ნახატები. მაგალითად, ქიმიურ პროგრამაში დახატული კვადრატი არ არის გეომეტრიული ფიგურა. პროგრამა მას განიხილავს როგორც ციკლობუტანს, ანუ ერთმანეთთან დაკავშირებულ ოთხ $-CH_2-$ ჯგუფს.

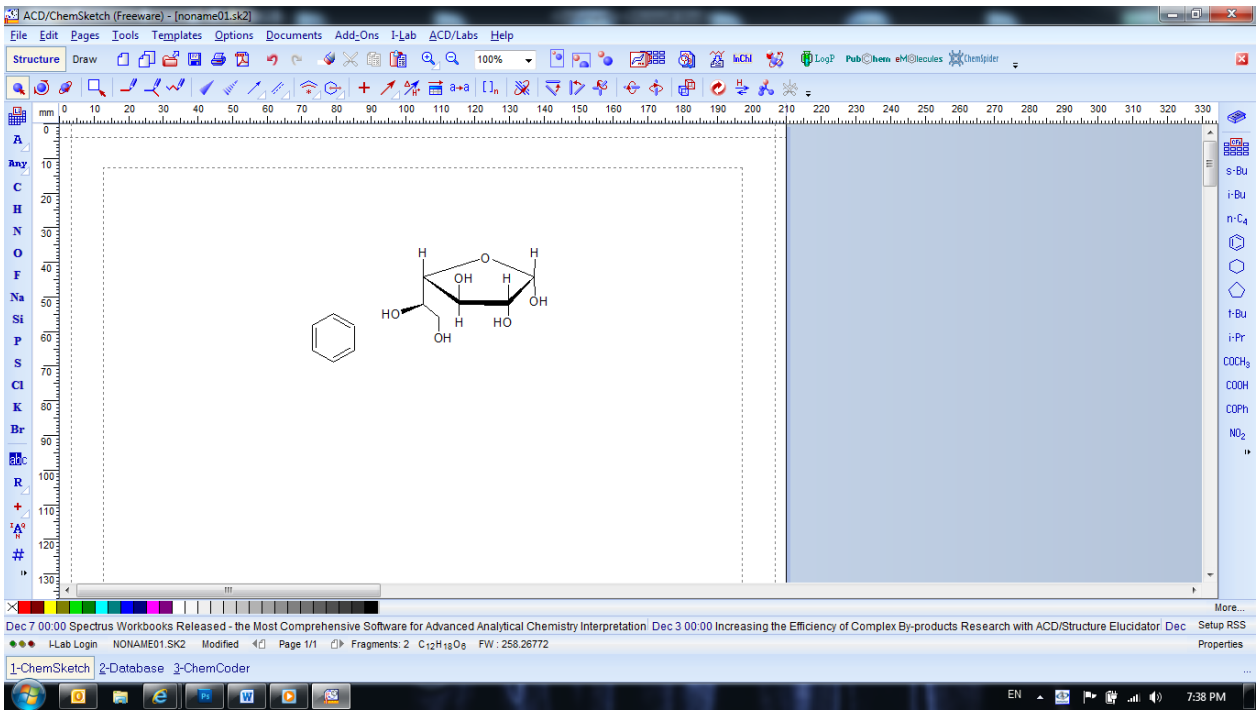
და მაინც რომელი პროგრამის გამოყენება ჯობია? ცხადია, თითოეულ მათგანს თავისი დადებითი და უარყოფითი მხარეები აქვს, მაგრამ შეიძლება ChemSketch-ისთვის უპირატესობის მინიჭება. იგი გაცილებით მძლავრი საშუალებაა, ვიდრე ISIS Draw და არაფრით ჩამოუვარდება საკმაოდ ძვირად ღირებულ ChemDraw-ს. საბედნიეროდ, ChemSketch-ის მწარმოებლები ტორონტოს უნივერსიტეტიდან (ACDLabs Co.) მას უფასო ვერსიის სახითაც ავრცელებენ და შესაძლებელია მისი უფასოდ ჩამოწერა და ინსტალირება შემდეგი ბმულიდან: http://acdlabs.com/resources/freeware/chemsketch/. გაითვალისწინეთ, რომ ჩამოსაწერად რეგისტრაციის გავლაა საჭირო.

ასევე უფასო კარგი რესურია ISIS Draw. მისი ჩამოწერა შეგიძლიათ შემდეგი ბმულიდან: http://mdlchime.com. პროგრამა ChemDraw მხოლოდ ფასიანი ვერსიის სახითაა გავრცელებული და მისი შეძენა საკმაოდ ძვირი სიამოვნებაა.

მიუხედავად ამისა, განვიხილოთ სტრუქტურული ფორმულების აგება სამივე პროგრამის საშუალებით.

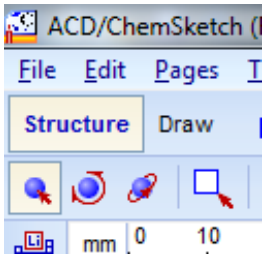
სტრუქტურების აგება პროგრამა Chemsketch-ის გამოყენებით

პროგრამა ChemSketch შედის პროგრამულ პაკეტში ACD Labs. პროგრამის ინტერფეისი მოცემულია ნახ. 1-ზე.



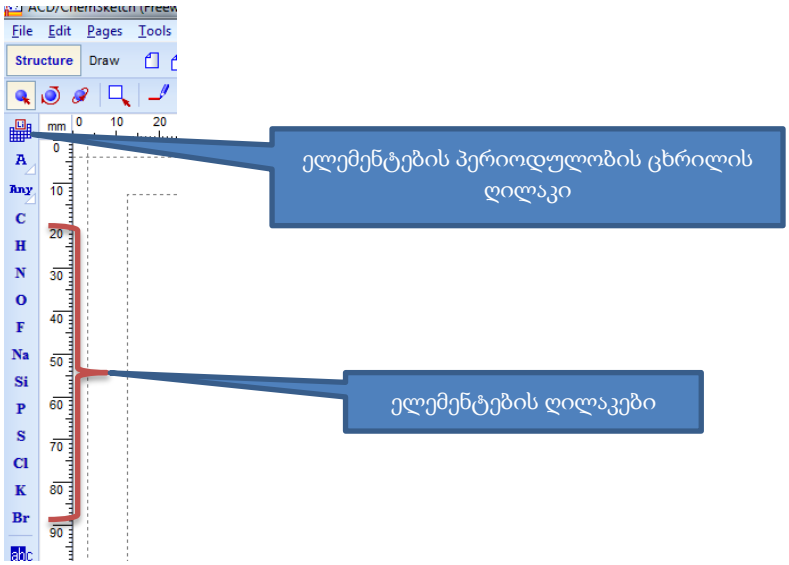
ნახ. 1. პროგრამა ChemSketch-ის ინტერფეისი

პროგრამას აქვს სტრუქტურის აგებისა (Structute) და ხატვის (Draw) რეჟიმი. მათი გადართვა ხდება ეკრანის ზედა მარცხენა კუთხეში მოთავსებული ღილაკებით (ნახ. 2).



ნახ. 2. სტრუქტურის აგებისა (Structute) და ხატვის (Draw) რეჟიმების გადასართავი ღილაკები

სტრუქტურის აგების დაწყებამდე აუცილებელია პროგრამის გადართვა სტუქტურის აგების რეჟიმზე. პროგრამის მარცხენა კიდესთან მოთავსებულია ელემენტების სწრაფი მიწვდომის პალიტრა. მასში ვერტიკალურად ჩამოთვლილია ძირითადი (შედარებით ხშირად საჭირო) ელემენტები (C, H, N, O, Cl, Br). თუ ელემენტი არ არის მოცემული ელემენტების სწრაფი მიწვდომის პალიტრაზე, მაშინ მისი გამოძახება შესაძლებელია ელემენტთა პერიოდულობის ცხრილის ღილაკით, რომელიც აღნიშნული პალიტრის თავზეა მოთავსებული (ნახ. 3). პერიოდულ ცხრილში შერჩეული ელემენტი თავსდება ელემენტების სწრაფი მიწვდომის პალიტრაზე.



ნახ. 3 ძირითადი მოწყობილობების პალიტრა

სტრუქტურის აგება იწყება ელემენტის შერჩევით და ეკრანზე თაგუნას ღილაკის დაწკაპუნებით.

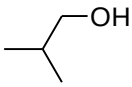
1. შევარჩიოთ ელემენტი C და დავაწკაპუნოთ თავისუფალ სივრცეზე. დაიხატება მეთანის CH_4-ის მოლეკულა.

2. კურსორი მივიყვანოთ ნახშირბადის ატომთან და ხელახლა დავაწკაპუნოთ. დაწკაპუნება უნდა მოხდეს მაშინ, როცა კურსორი შევა ელემენტის აქტიურ ზონაში, რაც გამოიხატება ელემენტის გარშემო რუხი მართკუთხედის გაჩენით. დაწკაპუნებით CH_4-ს მიემატება ერთი მეთილის ჯგუფი. ამასთან, პირველი ნახშირბადის ვალენტობა შესწოდება - დააკლდება ერთი წყალბადი. რედაქტირების ოფციებიდან გამომდინარე, შესაძლოა, ეკრანიდან "გაქრეს" ნახშირბად- და წყალბადატომები და სტრუქტურა მხოლოდ ბმების სახით იყოს გამოსახული.

3. კვლავ დავაწკაპუნოთ კურსორი ერთ-ერთ ნახშირბადზე. ეთანის მოლეკულა გადაიქცევა პროპანის მოლეკულად, რომელიც ასეთი ტეხილით იქნება გამოსახული:

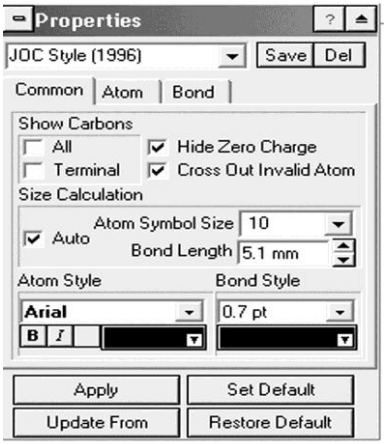
4. მივიყვანოთ კურსორი შუა ნახშირბადზე და დავაწკაპუნოთ. მოლეკულა გადაიქცევა იზობუტანად:

5. ერთ-ერთ განაპირა ნახშირბადატომზე ჩავანაცვლოთ ჰიდროქსილის ჯგუფი. ამისთვის ელემენტების სწრაფი მიწვდომის პალიტრიდან ავირჩიოთ ჟანგბადის ატომი. კურსორი მივიყვანოთ აგებული სტრუქტურის ერთ-ერთ განაპირა ნახშირბადატომთან, დავაჭიროთ მარცხენა ღილაკს და კურსორი გავაცუროთ რაიმე კუთხით. გაიჭიმება დამატებითი ბმა. თაგუნას ღილაკის გათავისუფლების შემდეგ ბმა ეკრანზე დაფიქსირდება და მოლეკულას ჩაენაცვლება OH-ჯგუფი:



თუ გვინდა, სტრუქტურაზე ყველა ატომი იყოს გამოსახული, მაშინ საჭიროა, სტრუქტურის თვისებების მენიუდან მიეცეს შესაბამისი ბრძანებები.

1. გამოვიძახოთ **Structure Properties** *(სტრუქტურის თვისებები)* მენიუდან **Tools** (*მოწყობილობები*).



ნახ. 4. სტრუქტურების თვისებების დიალოგის ფანჯარა

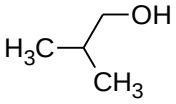
2. გავააქტიუროთ გადასართავი **Common** *(ძირითადი)* (ნახ. 4)

3. თუ მხოლოდ ტერმინალური ნახშირბადატომების ჩვენება გვინდა, ჩავრთოთ ჩასართავი **Terminal** *(ტერმინალური, განაპირა)*

4. გადავიდეთ მონიშვნის (სელექციის) რეჟიმში ღილაკზე დაწკაპუნებით.

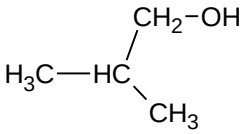
5. თაგუნას მარცხენა ღილაკზე თითის დაჭერით გავაცუროთ იგი დიაგონალურად ისე, რომ პუნქტირით გამოსახულ მართკუთხედში მოხვდეს მთელი სტრუქტურა. მონიშნულ სტრუქტურაზე პატარა კვადრატები გაჩნდება, რაც მის მონიშნულ ფრაგმენტზე მიუთითებს.

6. გავააქტიუროთ ღილაკი **Apply** *(მიანიჭე)* (ნახ. 4). სტრუქტურა მიიღებს შემდეგ სახეს:

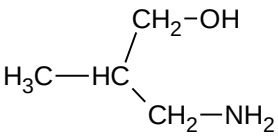


7. მოვნიშნოთ სტრუქტურა ხელახლა მთლიანად და ჩავრთოთ ჩასართავი **All** *(ყველა)* (ნახ. 4).

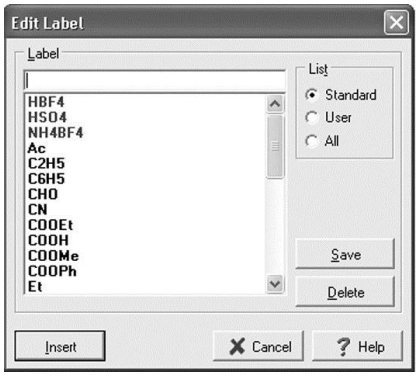
8. გავააქტიუროთ ღილაკი **Apply** *(მიანიჭე)*. ამჯერად სტრუქტურაზე ყველა ნახშირბადატომი იქნება გამოსახული:



როგორც ვნახეთ ჰიდროქსილის მაგალითზე, ელემენტების სწრაფი მიწვდომის ღილაკების საშუალებით შესაძლებელია ფუნქციური ჯგუფების ჩასმა. მაგრამ აღნიშნული ღილაკებიდან შესაძლებელია მხოლოდ წყალბადებით შევსებული ფუნქციური ჯგუფების ჩანაცვლება. მაგალითად, აზოტის ატომით მიიღება ამინოჯგუფი, გოგირდის ატომით – მერკაპტოჯგუფი და ა.შ. როგორ მოვიქცეთ, თუ საჭიროა ნიტრო- ან სულფოჯგუფის ჩასმა? ამისთვის ელემენტების სწრაფი მიღწევის პალიტრაზე დამონტაჟებულია ღილაკი , რომლის საშუალებითაც შესაძლებელია ნებისმიერი ჯგუფის ჩანაცვლება. ზემოთ აგებულ მოლეკულაში ერთ-ერთ პირველად ნახშირბადატომზე ჩავანაცვლოთ ნიტროჯგუფი. ამისთვის ჯერ უნდა ჩანაცვლდეს ნებისმიერი ელემენტი, მაგალითად, აზოტი. მოლეკულა მიიღებს ასეთ სახეს:



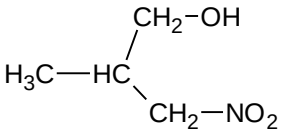
შემდეგ ავირჩიოთ ფუნქციური ჯგუფის ღილაკი. დავუბრუნდეთ აგებულ მოლეკულას და კურსორი მივუახლოოთ ამინოჯგუფს. იგი მოინიშნება ბაცი მართკუთხედით. მარცხენა ღილაკის დაწკაპუნება ეკრანზე გამოიტანს დიალოგის ფანჯარას (ნახ. 5).



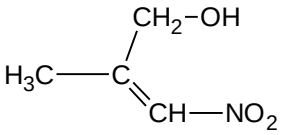
ნახ. 5. ფუნქციური ჯგუფის ჩართვის დიალოგის ფანჯარა

ტექსტურ ფანჯარაში შევიტანოთ "NO2" ან მოვძებნოთ იგი ნუსხაში.

ბოლოს გავააქტიუროთ ღილაკი **Insert** *(ჩასმა)* (ნახ. 5). სტრუქტურა მიიღებს ასეთ სახეს:

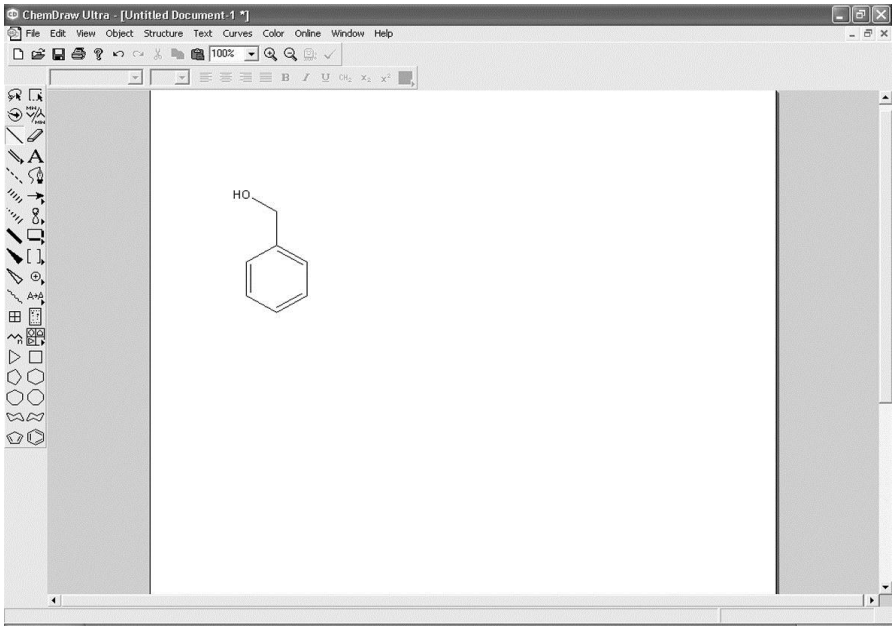


ჯერადი ბმების ასაგებად საჭიროა, კურსორი მივიყვანოთ ერთმაგ ბმაზე და მისი გააქტიურების შემდეგ (ბმა მოექცევა ბაც მართკუთხედში) დავაწკაპუნოთ. ყოველი დაწკაპუნება ბმის ჯერადობას ერთით გაზრდის, ანუ სამმაგი ბმის ასაგებად საჭიროა ორჯერადი დაწკაპუნება. სამმაგ ბმაზე დაწკაპუნება კი მას გადააქცევს ერთმაგ ბმად. მაგალითად, ზემომოყვანილი 2-მეთილ-3-ნიტრო-პროპანოლ-1-ის სტრუქტურა გადავაკეთოთ 2-მეთილ-3-ნიტრო-2-პროპენ-1-ოლად. ამისთვის კურსორი მივიყვანოთ ბმაზე, რომელიც მოთავსებულია C_2-C_3-ს შორის და მისი გააქტიურების შემდეგ დავაწკაპუნოთ. სტრუქტურა მიიღებს შემდეგ სახეს:



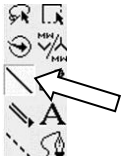
სტრუქტურების აგება პროგრამა ChemDraw-ში

პროგრამის ინტერფეისი მოცემულია ნახ. 6-ზე. სამუშაო სივრცის მარცხნივ მდებარეობს ძირითადი მოწყობილობების პანელი, რომლის საშუალებითაც შესაძლებელია ავირჩიოთ ქიმიური ბმის ხატვის, საშლელის, ქიმიური ელემენტების ჩართვის, ობიექტის მონიშვნის და სხვა რეჟიმები.

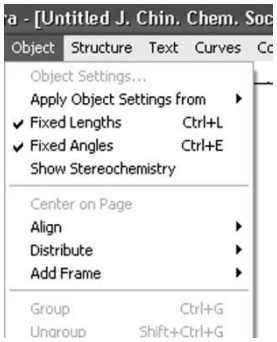


ნახ. 6. პროგრამა ChemDraw-ს ინტერფეისი

სტრუქტურის ასაგებად მთავარ იარაღს წარმოადგენს ქიმიური ბმის ღილაკი (მარცხენა სვეტში ზემოდან მესამე ღილაკი). იგი სურათზე ისრით არის აღნიშნული (ნახ. 7). სანამ უშუალოდ სტრუქტურის აგებას შევუდგებოდეთ, აუცილებელია ფიქსირებული ქიმიური ბმისა და ფიქსირებული ბმის კუთხის რეჟიმების ჩართვა. აღნიშნული რეჟიმების ჩართვის შემთხვევაში, სტრუქტურის აგებისას ყველა ბმა და ბმის კუთხე ერთნაირი იქნება, რაც სტრუქტურას უფრო ესტეთიკურ სახეს მიანიჭებს. მათი ჩართვა წარმოებს **Object** *(ობიექტი)* მენიუდან. თუ ბრძანებების **Fixd Length** *(ფიქსირებული სიგრძე)* და **Fixd Angles** *(ფიქსირებული კუთხე)* წინ მონიშვნის სიმბოლო არ არის, როგორც ქვემოთ მოცემულ ნახ. 88-ზეა ნაჩვენები, მაშინ საჭიროა თითოეულზე თაგუნას მარცხენა ღილაკის დაწკაპუნება.



ნახ. 7. ქიმიური ბმის აგების ღილაკი (ნაჩვენებია ისრით)



ნახ. 8. Oobject მენიუ.
ჩართულია ფიქსირებული ბმის სიგრძისა და ფიქსირებული ბმის კუთხის რეჟიმი

კურსორი სამუშაო სივრცეში შეტანისას იღებს პატარა ჯვრის სახეს. სტრუქტურის აგება იწყება საწყისი ერთი ბმის აგებით. ამისთვის დავაჭიროთ თაგუნას მარცხენა ღილაკს და გავაცუროთ დაახლოებით 30°-იანი კუთხით ზევით და მარჯვნივ. ეკრანზე გამოჩნდება ხაზი (ქიმიური ბმა), რომელიც განსაზღვრული სიგრძის მიღწევის შემდეგ შეწყვეტს ზრდას:

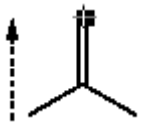
ავუშვათ თითი თაგუნას ღილაკს. ეკრანზე დარჩება ხაზი, რომელიც რეალურად წარმოადგენს ეთანის მოლეკულას. ქიმიური ბმის წვეროებში ყოველთვის იგულისხმება წყალბადატომებით შევსებული ნახშირბადატომი. ჩოჩხის გაგრძელებისთვის კურსორი მივიყვანოთ აგებული ქიმიური ბმის ერთ-ერთ ბოლოსთან. აღნიშნული ატომი მოინიშნება პატარა შავი კვადრატით:

დავაწკაპუნოთ თაგუნას მარცხენა ღილაკზე. აიგება დამატებითი ბმა 120°-იანი კუთხით:

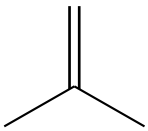
დავუბრუნდეთ წინა ნახშირბადატომს:

დავაწვეთ მარცხენა ღილაკს და გავაცუროთ ვერტიკალურად ზევით. აიგება განშტოებული ჩონჩხი. დავუბრუნდეთ ისევ წინა ნახშირბადატომს. მიიღება იზობუტანის მოლეკულა:

კვლავ დავაჭიროთ თაგუნას მარცხენა ღილაკს და გავაცუროთ ვერტიკალურად ზევით, სანამ არ მოინიშნება წინა ოპერაციისას აგებული ბმის მეორე ბოლო:

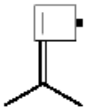


ავუშვათ თითი ღილაკს. აგებულ სტრუქტურას ექნება შემდეგი სახე:

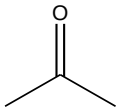


იგი წარმოადგენს იზობუტენის მოლეკულას.

როგორც აღვნიშნეთ, ბმების ბოლოებში ნახშირბადატომები იგულისხმება. ორმაგი ბმის ზევით მდებარე ნახშირბადატომი შევცვალოთ ჟანგბადის ატომით. ამისთვის კურსორი მივიყვანოთ აღნიშნულ წერტილში და ორჯერ სწრაფად დავაწკაპუნოთ. ეკრანზე გამოვა ტექსტის უჯრა:



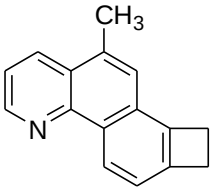
კლავიატურის საშუალებით ავკრიფოთ მაღალი რეგისტრის "**O" (Shift-O).** აგებული სტრუქტურა გარდაიქმნება აცეტონის მოლეკულად:



ციკლური ნაერთების სტრუქტურების ასაგებად პროგრამას აქვს სპეციალური ღილაკები, რომელთა საშუალებითაც შესაძლებელია 3-, 4-, 5-, 6-წევრიანი ციკლების აგება ერთი დაწკაპუნებით. მომხმარებელს აქვს საშუალება, ციკლოჰექსანი აირჩიოს სავარძლისა და ნავის კონფორმერების სახითაც. საკუთარი ღილაკი აქვს არომატულ ბირთვსაც (ნახ. 9).

ნახ. 9. ციკლური სტრუქტურების აგების ღილაკები

მაგალითად, ავაგოთ შემდეგი სტრუქტურა:

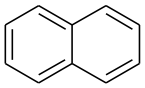


1. ავირჩიოთ არომატული სტრუქტურის შესაბამისი ღილაკი (ნახ. 9). კურსორი მიიღებს მცირე ზომის მუქი წერტილის მქონე ექვსკუთხედის სახეს.

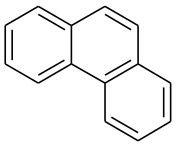
2. დავაწკაპუნოთ ეკრანზე ჩვენთვის სასურველ ადგილას. აიგება ბენზოლის მოლეკულა. კურსორს კი ისევ ექნება ექვკუთხედის სახე.

3. კურსორი მივუახლოოთ ბენზოლის მარჯვენა ვერტიკალურ ბმას მის მონიშვნამდე:

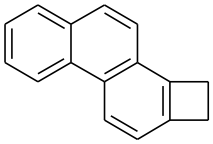
4. დავაწკაპუნოთ. მოლეკულა მიიღებს ნაფთალინის სახეს:



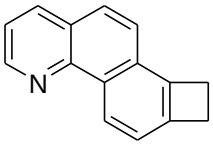
5. ასევე მოვიქცეთ კიდევ ერთი ფენილის ფრაგმენტის მისაშენებლად:



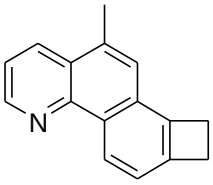
6. ავირჩიოთ ციკლობუტანის ღილაკი და ქვედა ბენზოლის მარჯვენა ვერტიკალური ბმის გააქტიურების შემდეგ დავაწკაპუნოთ:



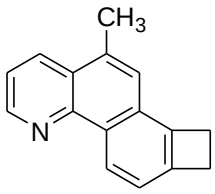
7. ერთ-ერთი არომატული ბირთვი შევცვალოთ ჰეტეროარომატულით. ამისთვის კურსორი მივიყვანოთ შესაბამის ატომზე და მისი მონიშვნის შემდეგ კლავიატურაზე დავაჭიროთ ღილაკს “**N**”.



8. ჩავანაცვლოთ მეთილის რადიკალი. ავირჩიოთ ქიმიური ბმის აგების რეჟიმი (როგორც წინა მაგალითში იყო ნაჩვენები). კურსორი მივიყვანოთ შესაბამის ნახშირბადატომზე და დავაწკაპუნოთ:



9. თუ გვინდა, მეთილის რადიკალში ჩანდეს ნახშირბად- და წყალბადატომები, კურსორი მივიყვანოთ ახალი ქიმიური ბმის ზედა ბოლოსთან და კლავიატურაზე ავკრიფოთ "**C**":



სტრუქტურის აგება დასახელების მიხედვით

პროგრამის ChemDraw 8.00 და უფრო მაღალი ვერსია საშუალებას იძლევა, ნაერთის სტრუქტურა აგებულ იქნეს დასახელების მიხედვით. ამისთვის უნდა გავააქტიუროთ ბრძანება **Convert Name to Structure** *(დასახელების სტრუქტურად გარდაქმნა)* მენიუდან **Structure** *(სტრუქტურა).* აღნიშნული ბრძანების გააქტიურების შემდეგ ეკრანზე გამოვა დიალოგის ფანჯარა, რომელშიც ნაერთის დასახელება ინგლისურ ენაზე IUPAC-ის პრინციპების მიხედვით უნდა იქნეს შეტანილი. შესაძლებელია სიმბოლოების “(”, “)”, “[“, “]”, “{“, “}”, გამოყენება, ასევე - E და Z კონფიგურაციის მითითიება. მაგალითად, ავაგოთ 2-Z-ბუტენის სტრუქტურული ფორმულა:

1. გავუშვათ პროგრამა ChemDraw.

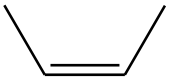
2. გავააქტიუროთ ბრძანება **Convert Name to Structure** *(დასახელების სტრუქტურად გარდაქმნა),* რომელიც მოთავსებულია მენიუში **Structure** *(სტრუქტურა).*

3. დიალოგის ფანჯარაში ჩავწეროთ ტექსტი 2-Z-butene.

4. თუ გვინდა, მოდელის ფანჯარაში სტრუქტურის აგების შემდეგ მის ქვეშ დაიწეროს ნაერთის დასახელებაც, მაშინ მოვნიშნოთ მონიშვნის უჯრა **Paste name below structure** *(სახელის ჩაწებება სტრუქტურის ქვეშ).* წინააღმდეგ შემთხვევაში გავაუქმოთ მონიშვნის ნიშანი.

5. გავააქტიუროთ ღილაკი Ok.

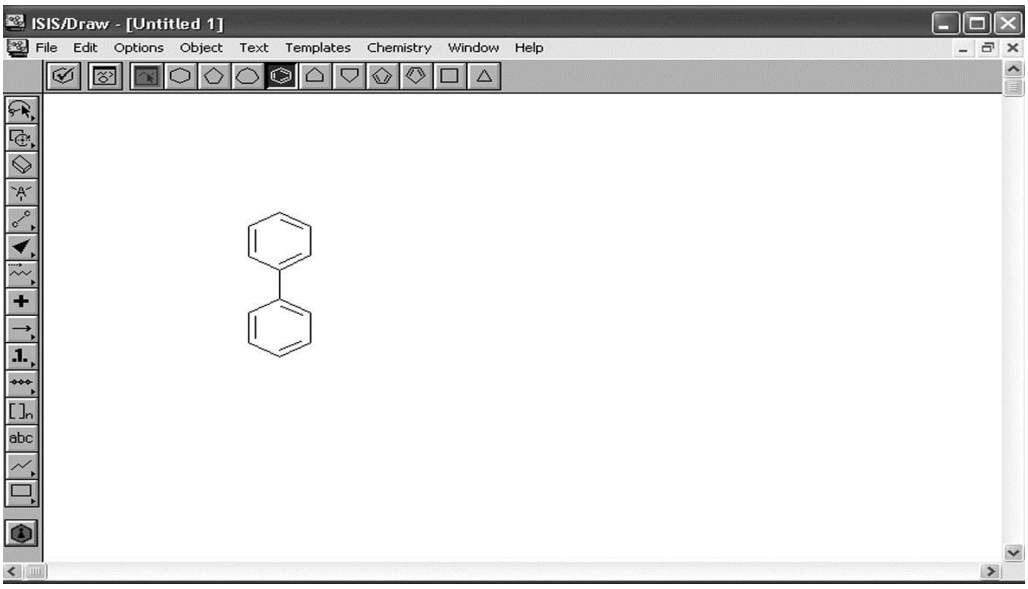
მიღებულ გამოსახულებას ექნება შემდეგი სახე:



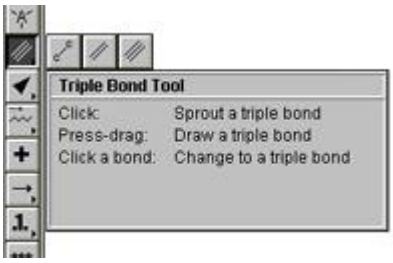
2-Z-butene

ქიმიური სტრუქტურების აგება პროგრამა ISIS Draw-ში

2D-გრაფიკული პროგრამებიდან ერთ-ერთი საინტერესო პროგრამაა ISIS Draw. იგი საკმაოდ კომპაქტური, მცირე მოცულობის, Windows-ის ყველა ვერსიასა და MS Office-ის პროგრამებთან კარგად თავსებადი პროგრამაა. მისი ინტერფეისი მოცემულია ნახ. 10-ზე.



ნახ. 10. პროგრამა ISIS Dკფც-ს ინტერფეისი



ნახ. 11. ბმის აგების მოწყობილობის ღილაკები პროგრამაში ISIS Draw

სტრუქტურის აგებისთვის ძირითად მოწყობილობას წარმოადგენს ქიმიური ბმა (მსგავსად პროგრამისა Chem Draw). იგი მოთავსებულია ეკრანის მარცხენა სვეტში განლაგებული მოწყობილობების პალიტრაზე და აქვს შემდეგი სახე:

აღნიშნული ღილაკის საშუალებით შესაძლებელია ერთმაგი და ჯერადი (რამდენიმეჯერ დაწკაპუნების შემთხვევაში) ბმების აგება. მაგრამ თუ თაგუნას ღილაკს რამდენიმე წამით თითდაჭერილს დავაყოვნებთ აღნიშნულ ღილაკზე, გაიხსნება დამატებითი, ჯერადი ბმების შესაბამისი ღილაკებიც (ნახ. 11). მათი არჩევის შემთხვევაში თაგუნას ყოველი ერთჯერადი დაწკაპუნებისას აიგება შესაბამისი ჯერადი (ორმაგი, სამმაგი) ბმა.

ახალაგებულ ბმას აქვს ორი პატარა კვადრატი (სელექციის წერტილები), რომელთაგან ერთი შუაშია მოთავსებული, ხოლო მეორე - ბმის ბოლოში. ჩონჩხის გასაგრძელებლად საჭიროა, კურსორი მივიყვანოთ ბმის ბოლოში მოთავსებულ სელექციის წერტილთან და ისე დავაწკაპუნოთ თაგუნას ღილაკზე. თუ სელექციის წერტილი სწორად არ მოვნიშნეთ, ბმა აიგება, მაგრამ მას კავშირი არ ექნება მანამდე აგებულ სტრუქტურასთან, რამაც ზოგიერთ შემთხვევაში შესაძლოა არასასურველ

შედეგებამდე მიგვიყვანოს, ამიტომ ყოველი ახალი ბმის აგებისას სწორად უნდა იქნეს შერჩეული მისი "მიერთების" წერტილი.

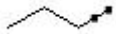
ავაგოთ მეთილვინილკეტონის მოლეკულის სტრუქტურა:

1. ავირჩიოთ ბმის აგების მოწყობილობა .

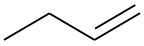
2. დავაწკაპუნოთ სამუშაო მაგიდის თავისუფალ ადგილას. აიგება ერთმაგი ბმა, რომელსაც ექნება ორი (შუაში და ბმის ბოლოში) სელექციის წერტილი:

3. კურსორი მივიყვანოთ ბმის ბოლოში მოთავსებულ სელექციის წერტილზე და დავაწკაპუნოთ. აიგება პროპანის მოლეკულა, ხოლო სელექციის წერტილები გადაინაცვლებს ახალაგებულ ბმაზე:

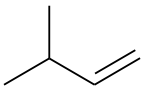
4. ანალოგიურად ავაგოთ კიდევ ერთი ბმა. მივიღებთ ნ-ბუტანის სტრუქტურას:



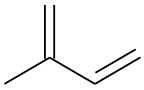
5. კურსორი მივიყვანოთ ბმის შუაში მოთავსებულ სელექცის წერტილზე და დავაწკაპუნოთ. ერთმაგი ბმა გადაიქცევა ორმაგ ბმად:



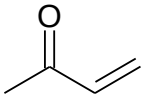
6. ახლა დავაკავშიროთ კეტონის ჯგუფი. კურსორი მივიყვანოთ შესაბამის ნახშირბადატომზე და დავაწკაპუნოთ ერთხელ:



7. ახალაგებული ბმა გადავაქციოთ ორმაგ ბმად. ამისთვის კურსორი მივიყვანოთ ბმაზე და დავაწკაპუნოთ:



8. დავაკავშიროთ ჟანგბადის ატომი. ძირითადი მოწყობილობების პალიტრიდან ავირჩიოთ ელემენტის ჩართვის ინსტრუმენტი და მივიყვანოთ კურსორი ორმაგი ბმის ბოლოსთან. დავაწკაპუნოთ. ეკრანზე გამოვა ჩამოსაშლელი ნუსხა, რომელშიც ელემენტებია ჩამოთვლილი. შევირჩიოთ “O”.



როგორ ავაგოთ უფრო რთული მოლეკულური სტრუქტურები? ცხადია, მათი აგება ზემოთ განხილული მარტივი ელემენტების საშუალებით სავსებით შესაძლებელია, მაგრამ შრომატევადი, ამიტომ მათი რედაქტირებისთვის იყენებენ სპეციალურ შაბლონებს, რომელთა საშუალებით პროცედურები მარტივდება. მომდევნო წერილში შედარებით რთულ სტრუქტურებს განვიხილავთ.