ელიზბარ ელიზბარაშვილი

## რთული მოლეკულური სტრუქტურების აგება

ვინც გაეცანით ჩემს ორ წინა წერილს და უკვე სცადეთ კიდეც მოლეკულათა სტრუქტურული ფორმულების აგება, დაინახავდით, რომ, მიუხედავად კომპიუტერის დახმარებისა, არაერთ სირთულეს შეეჯახეთ. პირველი, რაც ამ დროს არ გვაკმაყოფილებს, კომპიუტერის "დაუმორჩილებლობაა" - აგებული მოლეკულური მოდელი მთლად ისე არ გამოიყურება, როგორც წარმოგვედგინა.

გულს ნუ გაიტეხთ, ეს მცირე "უხერხულობები" პროგრამების არასათანადო ცოდნით არის გამოწვეული. ცოტა მეტი ძალისხმევა, ცოტა უფრო ღრმად ჩახედვა მათ შესაძლებლობებში და თაგუნას მარტივი მოძრაობით ჩვენთვის საჭირო ნებისმიერი სირთულისა და ფორმის სტრუტურის აგებას ვუდირიჟორებთ.

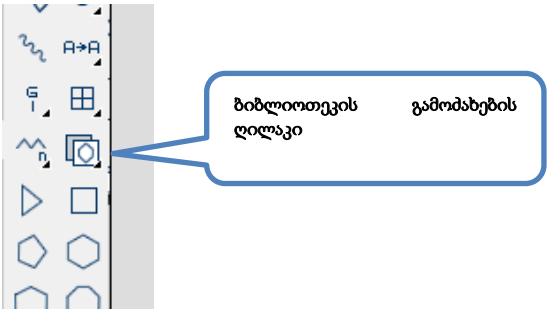
უპირველესად, აი, რა მინდა გირჩიოთ: აგებული სტრუქტურა ეკრანზე ცოტა "დაღრეჯილი" თუ ჩანს - ბმის სიგრძეები და კუთხეები არათანაბარია და იგი "არაესთეტიკურად" გამოიყურება, - ნუ დაკარგავთ დროს მათ "შესწორებაზე". ეს უამრავ დროს წაგართმევთ და არც მხედველობას წაადგება. მომდევნო წერილში ვნახავთ, როგორ შეიძლება ამ პრობლემის მოგვარება წინასწარ ან თითის ერთი დაჭერით.

ახლა კი რთული სტრუქტურების აგებას შევუდგეთ. 2D-გრაფიკულ პროგრამებში სტრუქტურების აგების გასამარტივებლად შექმნილია სპეციალური ბიბლიოთეკები, რომელთა საშუალებით შესაძლებელია როგორც სხვადასხვა კლასის ნაერთების სტრუქტურების, ისე ცალკეული ფრაგმენტების (რადიკალებისა და ფუნქციური ჯგუფების) არჩევა. ძებნის გასამარტიველად აღნიშნული ელემენტები დაჯგუფებულია კლასების მიხედვით. თითოეული პროგრამა ისევ ცალ-ცალკე განვიხილოთ.

## სტრუქტურული ბიბლიოთეკები პროგრამა ChemDraw-ში

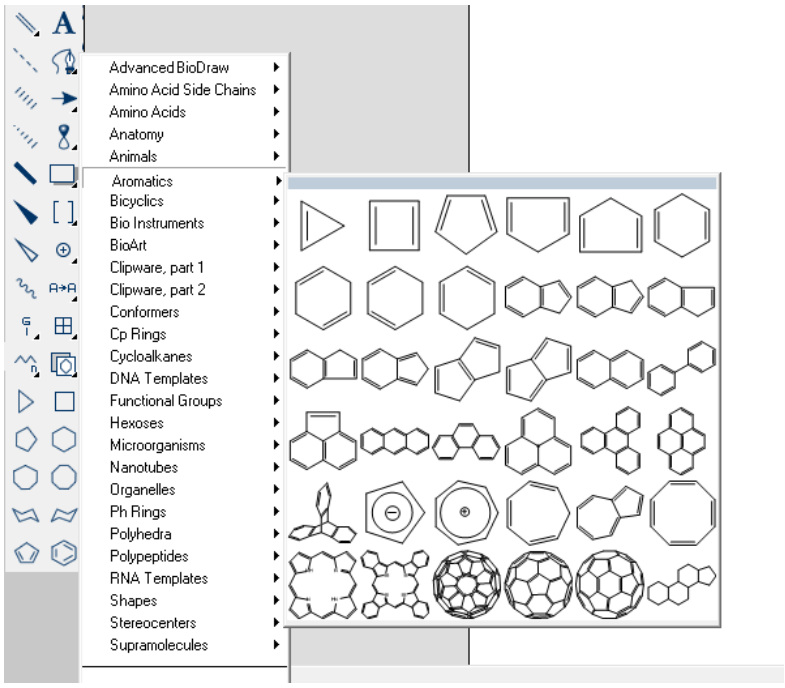
პროგრამა ChemDraw-ში ბიბლიოთეკის გამოძახება ძირითადი მოწყობილობების პალიტრიდან ხდება.

პროგრამა ChemDraw-ში ბიბლიოთეკის გამოძახება ძირითადი მოწყობილობების პალიტრიდან ხდება.




აღნიშნულ ღილაკზე თაგუნას დაწკაპუნებით გაიხსნება მენიუ, რომელშიც ჩამოთვლილია ნაერთების კლასები. აქ ჩვენ შეგვიძლია ავარჩიოთ შემდეგი კლასის ნაერთები: ამინმჟავები, არომატული, ბიციკლური, მონოციკლური ნაერთები, რიბონუკლეინ- და დეზოქსირიბონუკლეინმჟავები და სხვა. ქვემოთ მოყვანილ სურათზე ნაჩვენებია

არომატული სტრუქტურები, რომელთა შერჩევაც შესაძლებლია ბიბლიოთეკიდან.

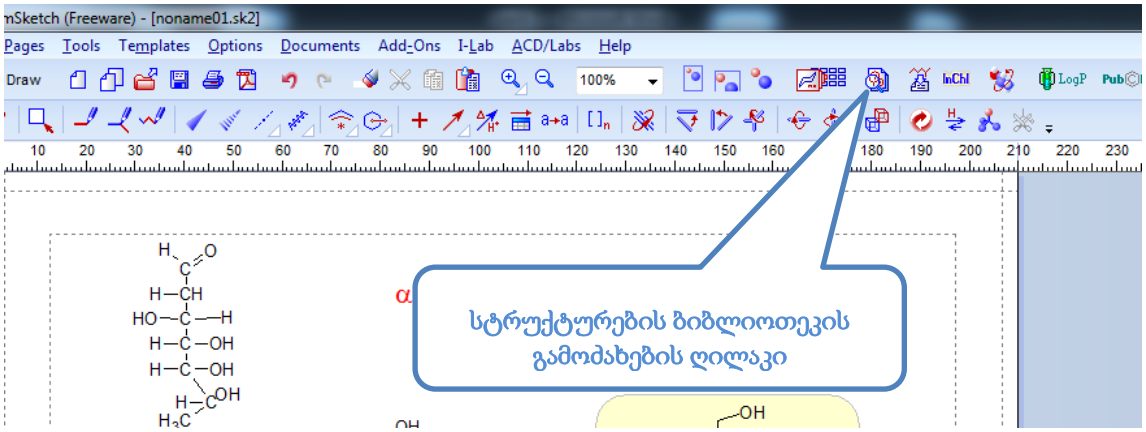



*არომატული სტრუქტურების ბიბლიოთეკა*

პალიტრიდან საჭირო სტრუქტურის ასარჩევად შესაბამის სტრუქტურაზე თაგუნას ღილაკს დააწკაპუნებთ. მისი არჩევის შემდეგ მენიუ იხურება და კურსორი სამუშაო სივრცეში ბრუნდება. თაგუნას კურსორის სასურველ ადგილზე მიყვანით და დაწკაპუნებით ეკრანზე საბოლოოდ დაფიქსირდება შერჩეული მზა სქტრუქტურა. ამგვარად შექმნილ მოდელს აქვს რეალური ქიმიური სტრუქტურის თვისება, ანუ შესაძლებელია მასზე დამატებითი ბმების ჩართვა.

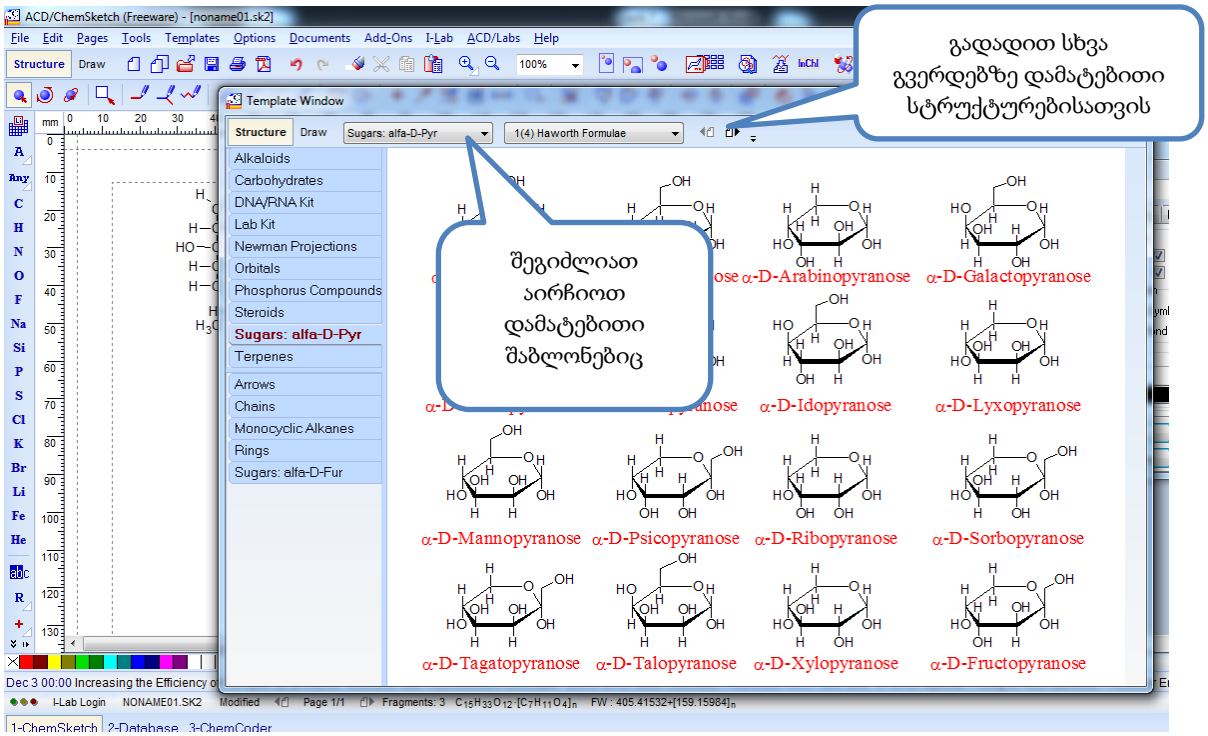
## სტრუქტურული ბიბლიოთეკები პროგრამა ChemSketch-ში

პროგრამა ChemSketch-ში სტრუქტურების ბიბლიოთეკის გამოძახება რამდენიმე მეთოდით არის შესაძლებელი. უმარტივეს და უმოკლეს მეთოდს წარმოადგენს შესაბამის პიქტოგრამაზე დაწკაპუნება. ბიბლიოთეკის ღილაკი მოთავსებულია მარჯვენა კუთხეში, მთავარი მენიუს ზოლის ქვეშ.




ბიბლიოთეკის გამოძახების მეორე ასევე სწრაფი მეთოდია ე.წ. "ცხელი ღილაკი". კლავიატურაზე **F5** ღილაკის გააქტიურება იდენტურია ზემოთ აღწერილი ოპერაციისა. მესამე მეთოდს წარმოადგენს პროგრამის მენიუდან შესაბამისი ბრძანების გაცემა. ამ შემთხვევაში ბიბლიოთეკის გამოსაძახებლად უნდა გავააქტიუროთ ბრძანება **Tamplate Window** *(შაბლონების ფანჯარა)*, რომელიც მოთავსებულია მენიუში **Tamplates** *(შაბლონები)*.

სამივე აღწერილ მოქმედებას მივყავართ ეკრანზე ბიბლიოთეკის ფანჯრის გახსნამდე.




ფანჯრის მარცხენა მხარეს ჩამოთვლილია ჯგუფები, რომლებიც ერთი კლასის სტრუქტურებს აერთიანებს. ასეთი ღილაკი 15-ია. თუმცა პროგრამას უფრო მეტი მზა შაბლონი აქვს. მათი გამოძახება ხდება ფანჯრის თავზე ჩამოსაშლელი ნუსხიდან. გარდა ამისა, ერთი კლასის შაბლონების რაოდენობა შესაძლოა უფრო მეტი იყოს, ვიდრე ეკრანზე დაეტევა. ამ შემთხვევაში საჭიროა მომდევნო გვერდებზე გადასვლა შესაბამისი ღილაკების საშუალებით, რომლებიც ასევე ფანჯრის ზედა ნაწილშია

დამონტაჟებული. ზემოთ მოყვანილ სურათზე ჩანს, რომ შერჩეულია შაქრების სტრუქტურების შაბლონები (**Sugers: alfa-D-Pyr)**, რომელთა მონაცემებიც იკავებს ოთხ გვერდს "**1(4) Page 4".**

ბიბლიოთეკიდან შერჩეული სტრუქტურა ორგვარად შეიძლება იქნეს აღებული: როგორც ქიმიური სტრუქტურა და როგორც ნახატი. პირველისთვის ბიბლიოთეკის ელემენტის არჩევისას ჩართული უნდა იყოს **Structure** *(სტრუქტურა)* რეჟიმი (შეგახსენებთ, რომ ის ირთვება ბიბლიოთეკის გამოძახებამდე, ეკრანის მარცხენა კუთხეში მოთავსებული გადასართავი ღიკლაკით). ამ რეჟიმში მოლეკულის არჩევისას საშუალება გვეძლევა, სტრუქტურასთან ერთად შევარჩიოთ ის ბმაც ან ატომიც, რომლის საშუალებითაც უნდა დაუკავშირდეს იგი სხვა სტრუქტურას. მაგალითად, ბიბლიოთეკის დახმარებით ავაგოთ დიფენილისა და ნაფთალინის მოლეკულები.

დიფენილის მოლეკულის ასაგებად თანამიმდევრულად შევასრულოთ შემდეგი ოპერაციები:

**1.** გამოვიძახოთ ბიბლიოთეკის ფანჯარა F5 ღილაკზე თითის დაჭერით (ან ზემოთ აღწერილი რომელიმე სხვა მეთოდით);

**2.** მარცხენა მხარეს ჩამოთვლილ ნაერთების კლასებში მოვძებნოთ არომატული (Aromatics) შაბლონები და გავააქტიუროთ შესაბამისი ღილაკი. თუ ჩამოთვლილ ნუსხაში აღნიშნული ღილაკი არ აღმოჩნდა, მაშინ იგი გამოვიძახოთ ჩამოსაშლელი ნუსხიდან;

**3.** კურსორი მივიყვანოთ ბენზოლის სტრუქტურასთან. კურსორის მიახლოებისას ბენზოლის სტრუქტურის ცალკეული ელემენტები (ნახშირბადატომები და ბმები) მოინიშნება, რაზეც ბაცი მართკუთხედის გამოჩენა მიგვანიშნებს. კურსორი შევაჩეროთ ერთ-ერთ ნახშირბადატომზე და ისე "ავიღოთ" მოლეკულა;

**4.** სამუშაო სივრცეში დაბრუნების შემდეგ ბენზოლის ბაცი მოლეკულა გადაადგილდება კურსორთან ერთად. ეკრანზე მისი ფიქსაციისთვის დავაწკაპუნოთ სასურველ ადგილზე. ეკრანზე დაიხატება ერთი ბენზოლის მოლეკულა, ხოლო ბაცი სტრუქტურა კვლავ გააგრძელებს მოძრაობას კურსორთან ერთად;

**5.** ბენზოლის ერთი მოლეკულა უკვე ავაგეთ. ახლა საჭიროა მასთან მეორის დაკავშირება. კურსორი მივუახლოოთ უკვე აგებულ ბენზოლის მოლეკულას. შევამჩნევთ, რომ როდესაც კურსორი ერთ-ერთი ნახშირბადატომის სიახლოვეს იმყოფება, ბაცი ხაზის საშუალებით მყარდება კავშირი ბენზოლის "მუქ" და "ბაც" მოლეკულებს შორის (ამასთანავე, მივაქციოთ ყურადღება, რომ ბენზოლის ბმებთან კურსორის მიახლოებისას არავითარი რეაქცია არ ექნება "ბაც" მოლეკულას). დავაწკაპუნოთ თაგუნას ღილაკზე. ეკრანზე აიგება დიფენილის მოლეკულა.

ახლა ავაგოთ ნაფთალინის მოლეკულა:

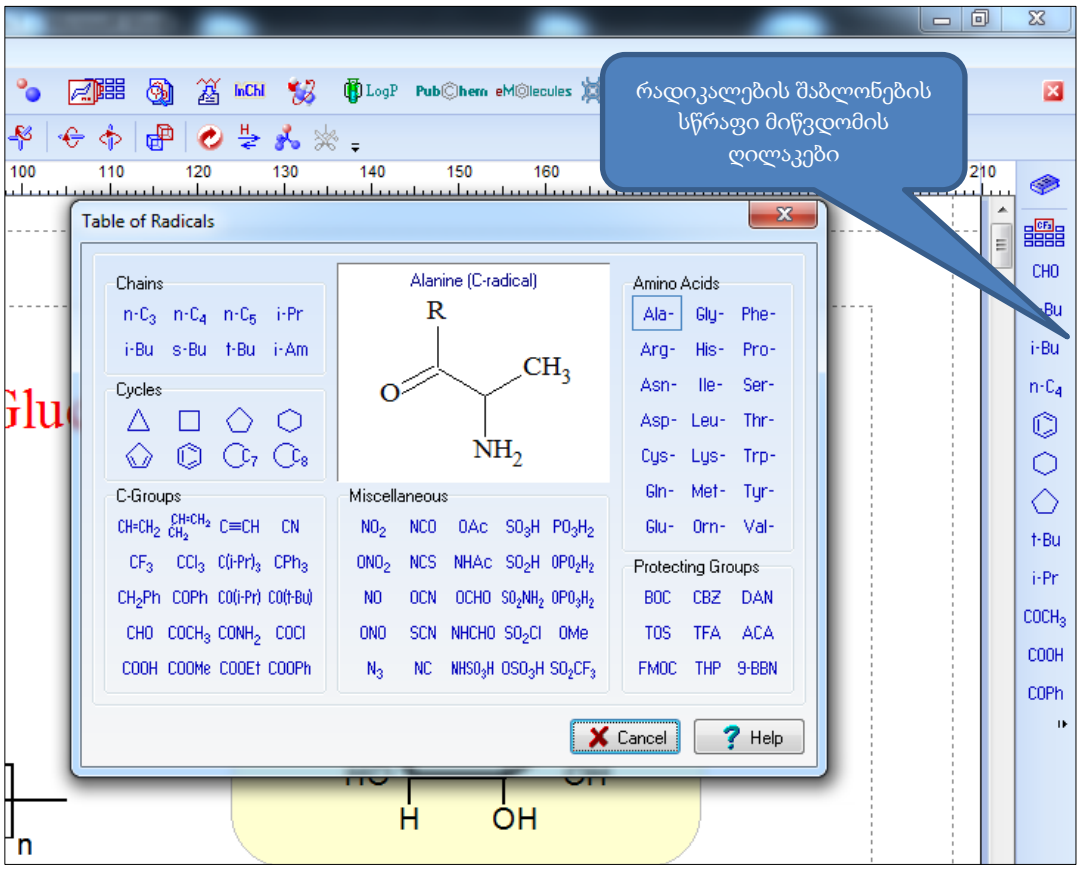
**1.** ანალოგიურად გამოვიძახოთ ბიბლიოთეკის ფანჯარა;

**2.** შევარჩიოთ ბენზოლის მოლეკულა იმ დროს, როდესაც ბაცი მართკუთხედი იქნება ერთ-ერთი ბმის გარშემო;

**3.** სამუშაო ეკრანზე დავაწკაპუნოთ. დაიხატება ერთი ბენზოლის მოლეკულა, ხოლო ბაცი ბენზოლის მოლეკულა, წინა მაგალითის ანალოგიურად, გააგრძელებს მოძრაობას კურსორთან ერთად;

**4.** მივუახლოოთ კურსორი უკვე აგებულ ბენზოლის მოლეკულას. ვნახავთ, რომ, წინა შემთხვევისგან განსხვავებით, "მუქ" და "ბაც" მოლეკულებს შორის კავშირი წარმოიქმნება მხოლოდ კურსორის ბმასთან მიახლოებისას. წარმოქმნილი ბმის შემთხვევაში დავაწკაპუნოთ. დაიხატება ნაფთალინის მოლეკულა.

პროგრამა ChemSketch მოლეკულების შაბლონებთან ერთად მოიცავს რადიკალების შაბლონებსაც. რადიკალების შაბლონების ფანჯრის გამოძახება შესაძლებელია F6 ღილაკის გააქტიურებით. შერჩევის შემდეგ რადიკალი ემატება აგრეთვე სწრაფი მიწვდომის პალიტრას, რომელიც მოთავსებულია პროგრამის მარჯვენა ვერტიკალურ სვეტში და საიდანაც შესაძლებელი ხდება მისი შემდგომი შერჩევა დიალოგის ფანჯრის ხელახალი გამოძახების გარეშე.



**სტრუქტურული ბიბლიოთეკები პროგრამა ISIS Draw-ში**

პროგრამა ISIS Draw-ში სტრუქტურების ბიბლიოთეკის გამოძახება ხდება უშუალოდ მენიუდან **Tamplates** *(შაბლონები).* ნაერთების რომელიმე კლასის შესარჩევად უნდა გააქტიურდეს შესაბამისი ბრძანება. მაგალითად, ამინმჟავებისათვის - Amino Acids, არომატული სტრუქტურებისათვის - Aromatics და ა.შ. ბრძანება **Open** *(გახსნა)* მენიუ-დან **Tamplates** *(შაბლონები)* საშუალებას გვაძლევს გავხსნათ ერთი კონკრეტული სტრუქტურა, რომელიც სისტემაში ჩაწერილია შესაბამისი *.SKC გაფართოების მქონე ფაილების სახით. აქვე უნდა აღინიშნოს, ამ უკანასკნელ შემთხვევაში აუცილებელია მიზნობრივი შაბლონის ფაილის ზუსტი დასახელების ცოდნა და, ამდენად, ეს მეთოდი ნაკლებად ხელსაყრელია.

შაბლონის გამოძახება და მისი დატანა სამუშაო მაგიდაზე ანალოგიურია წინა პარაგრაფში განხილული შემთხვევისა, ამიტომ ამ თავში მას დაწვრილებით აღარ განვიხილავ.