

ХІМІЧНИЙ РЕДАКТОР MARVINSKETCH У КУРСАХ ІНФОРМАЦІЙНИХ ТЕХНОЛОГІЙ

Супрунович С. В., Кормош Ж. О.

Волинський національний університет імені Лесі Українки, м. Луцьк, Україна
Suprunovich.Sergey@vnu.edu.ua

Редактори хімічних структур посідають значне місце в практиці хіміка, технолога, еколога, фармацевта, вчителя хімії. Тому цей вид програмного забезпечення вивчається у відповідних курсах інформаційних технологій. Серед багатьох програмних рішень [1], що були створені до цього часу, слід виділити хімічний редактор *ChemAxon MarvinSketch* [2]. У зв'язку з лібералізацією ліцензійної політики виробника цього програмного забезпечення стало можливим використання та вивчення цього хімічного редактора в курсах інформаційних технологій.

Інформаційні технології ґрунтовно вкорінилися в якості нормативних дисциплін у навчальних планах підготовки бакалаврів. На факультеті хімії, екології та фармації Волинського національного університету імені Лесі Українки викладаються наступні дисципліни цього циклу: «Інформаційні технології в галузі хімії», «Інформаційні технології в галузі знань», «Інформаційні технології в освіті», «Інформаційні технології у фармації». Однією з тем є засвоєння навиків роботи з хімічними редакторами.

В плані цих програм студенти звичайно вивчають два напрямки застосування — побудова структур молекул, котрі потім використовуються в пошукових сервісах та розрахунках, і використання в презентаційних цілях, для ілюстрації наукових публікацій. З цієї точки зору *MarvinSketch* показує чудові можливості для виконання завдань першого типу, але посередні можливості для підготовки ілюстративного матеріалу.

Як і в більшості сучасних хімічних редакторів, структури, побудовані в *MarvinSketch* є векторними зображеннями, що несуть із собою певні хімічні властивості зображених сполук. Звичайно вершини графів молекул є атомами карбону або гетероатомами, які сполучаються (явно чи не явно) з відповідною кількістю атомів гідрогену, до досягнення типової валентності. Наприклад, карбон завжди чотиривалентний, кисень — двовалентний, гідроген — одновалентний.

MarvinSketch — це вдосконалений хімічний редактор для побудови хімічних структур, запитів і реакцій. Він має багатий список функцій редагування, володіє засобами перевірки коректності хімічних структур та реакцій, містить плагіни обчислень на основі структур.

Слід відмітити можливість використання абревіатур радикалів. Єдине, що для цього використаний простий та не очевидний спосіб — ви повинні почати набирати назву радикалу, коли курсор стоїть на виділеному атомі, й ніщо не говорить за те, що в цьому режимі можливо взагалі набирати хоч якийсь текст.

Важливий інструмент, котрий вже давно існує в *MarvinSketch* — можливість називати зображені структури згідно систематичної номенклатури. Для деяких речовин доступні також тривіальні назви.

Редактор має свій рідний формат MRV, проте може працювати з рядом таких розповсюджених хімічних форматів як CDX, SKC, SDF, RDF, RXN, MOL, MOL2, Дозволяє імпортувати та експортувати описи структур в таких нотаціях як SMILES, SMARTS, InChi.

На відміну від інших хімічних редакторів MarvinSketch має широкі можливості копіювання виділених структур безпосередньо як у різні хімічні формати, так і графічні, такі як PNG, JPG, BMP, EMF. Є можливість навіть копіювання в буферну пам'ять систематичної чи емпіричної назви сполуки.

Підтримується можливість вставлення структур у вигляді OLE-об'єктів у інші програми (текстові та табличні процесори, графічні редактори, програми створення презентацій).

Слід відмітити також штучний інтелект MarvinSketch. Редактор перевіряє синхронно із побудовою структур помилки у валентності.

Варто згадати можливості QSAR, котрі раніше були доступні лише за умови придбання платних ліцензій. Сюди входить передбачення pK_a , розподіл різних іонізованих форм в залежності від pH, обчислення $\log D$, $\log P$, прогнозування спектрів ЯМР, конформаційний аналіз та багато інших.

MarvinSketch має дистрибутиви для всіх сучасних операційних систем. Він може працювати не тільки на Window, але й на Linux і Mac.

Звичайно засвоєння хімічного редактора — чисто практичне завдання. На лекції неможливо одержати відповідні навички. Тому хімічні редактори вивчаються на лабораторних роботах. Звичайно відводиться дві години на засвоєння навичок правильної побудови структур і дві години на тренування відображення ланцюжків перетворень.

При засвоєнні програми MarvinSketch, перш за все, студенти повинні зрозуміти принципи роботи хімічних редакторів, зв'язок побудованих на екрані структур з реальними молекулами.

Слід наголошувати студентам про необхідність коректного відображення структур, так як помилки можуть проявитись в майбутньому, починаючи від некоректного пошуку в базі даних до спотворення зовнішнього вигляду схеми реакції при перенесенні документу на інший комп'ютер.

Зважаючи на вищесказане, хімічний редактор MarvinSketch є зручним інструментом у практичній роботі фахівця, пов'язаний з хімією, і тому заслуговує вивчення при підготовці майбутніх фахівців у галузі хімії, хімічної освіти, хімічної технології, екології чи фармації, і сприятиме кращому володінню сучасними спеціалізованими програмними засобами.

Література:

1. Gunda E. T. Chemical Drawing Programs – The Comparison of Accelrys (Biovia) Draw, ChemBioDraw (ChemDraw), DrawIt, ChemSketch, ChemDoodle and Chemistry 4-D Draw / Tamas E. Gunda © 17.2.1916. URL: <https://www.gunda.hu/dprogs/> (дата звернення 27.05.2022).
2. MarvinSketch : chemical editor / Copyright © 1998-2021. ChemAxon Ltd. URL: <https://chemaxon.com/products/marvin> (дата звернення 27.05.2022).