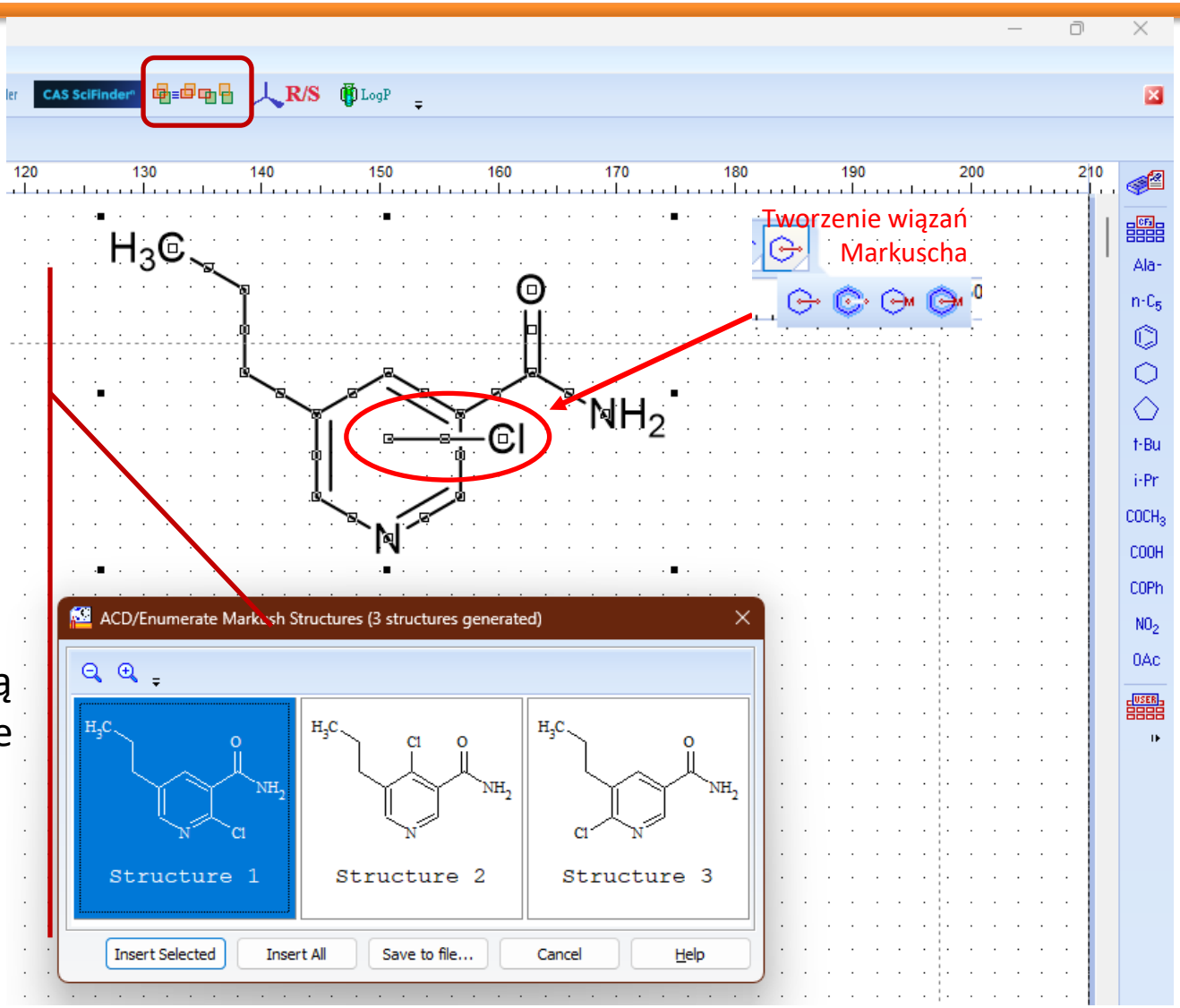
Techniki informatyczne laboratoria komputerowe

ACD/ChemSketch – generatory

Tomasz Lubera

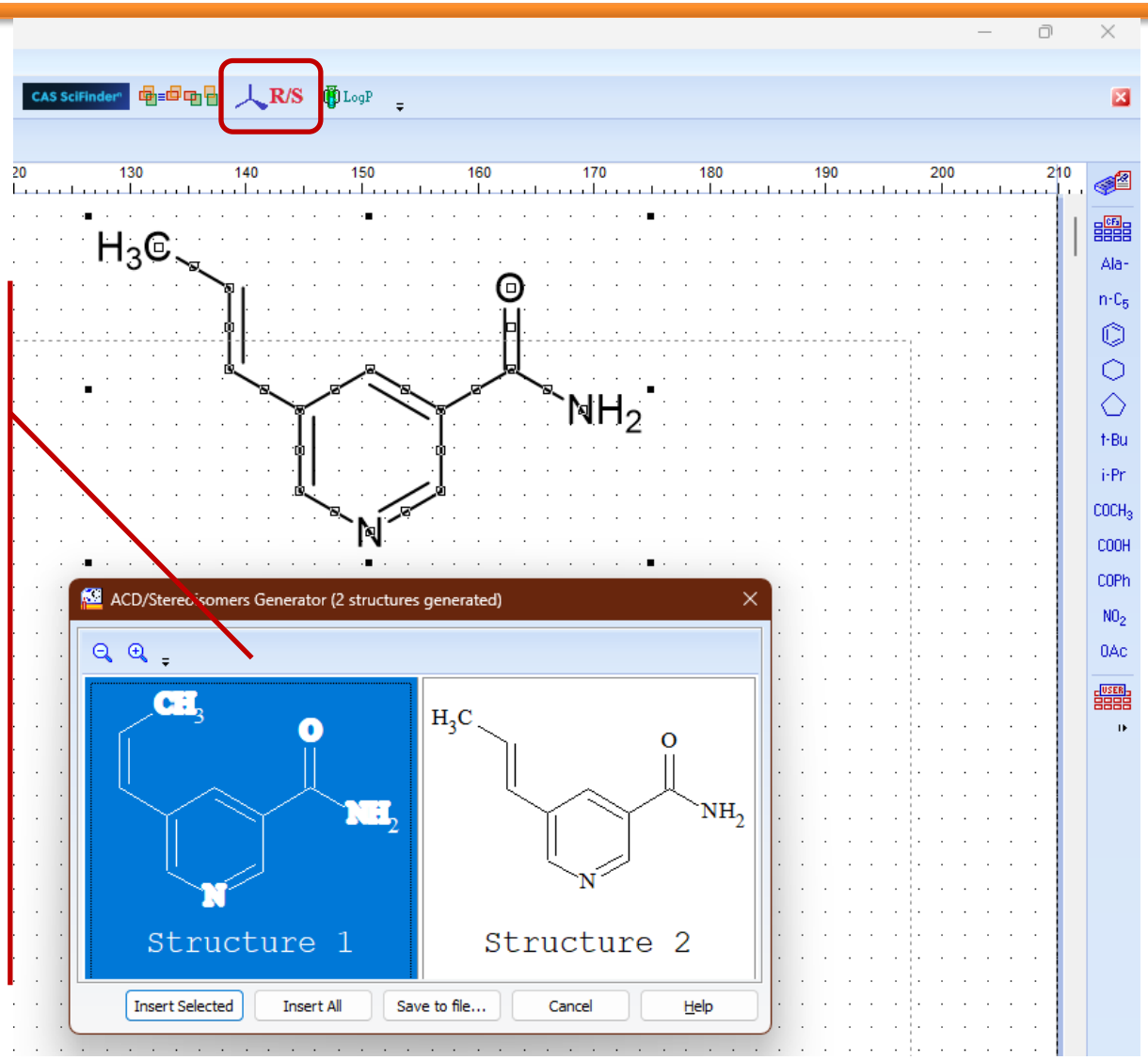
Enumerate Markush Structure

Narzędzie tworzy wszystkie możliwe cząsteczki odpowiadające strukturze Markusha

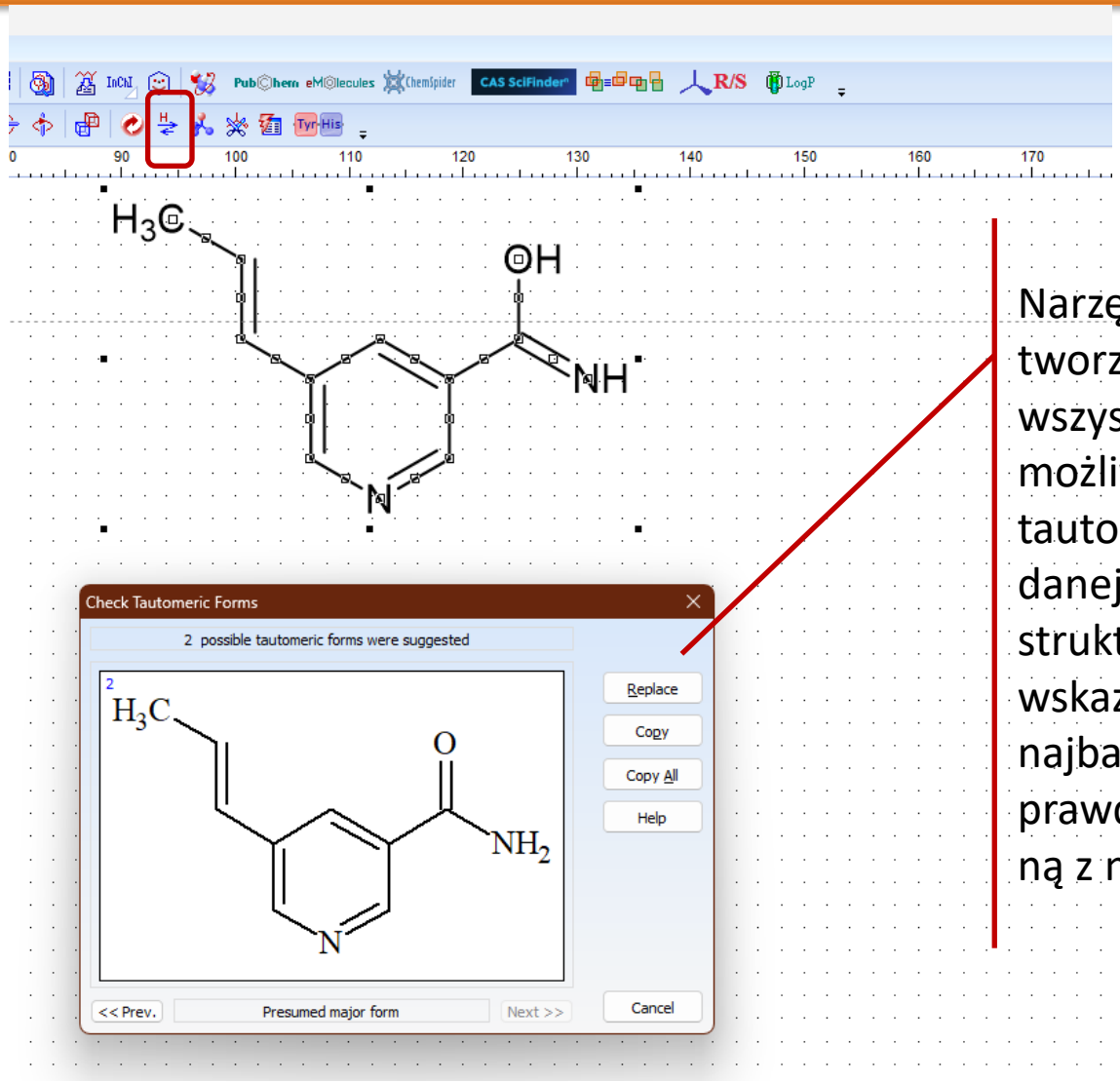


Stereoisomers generator

Narzędzie tworzy wszystkie możliwe stereoizomery dla danej substancji



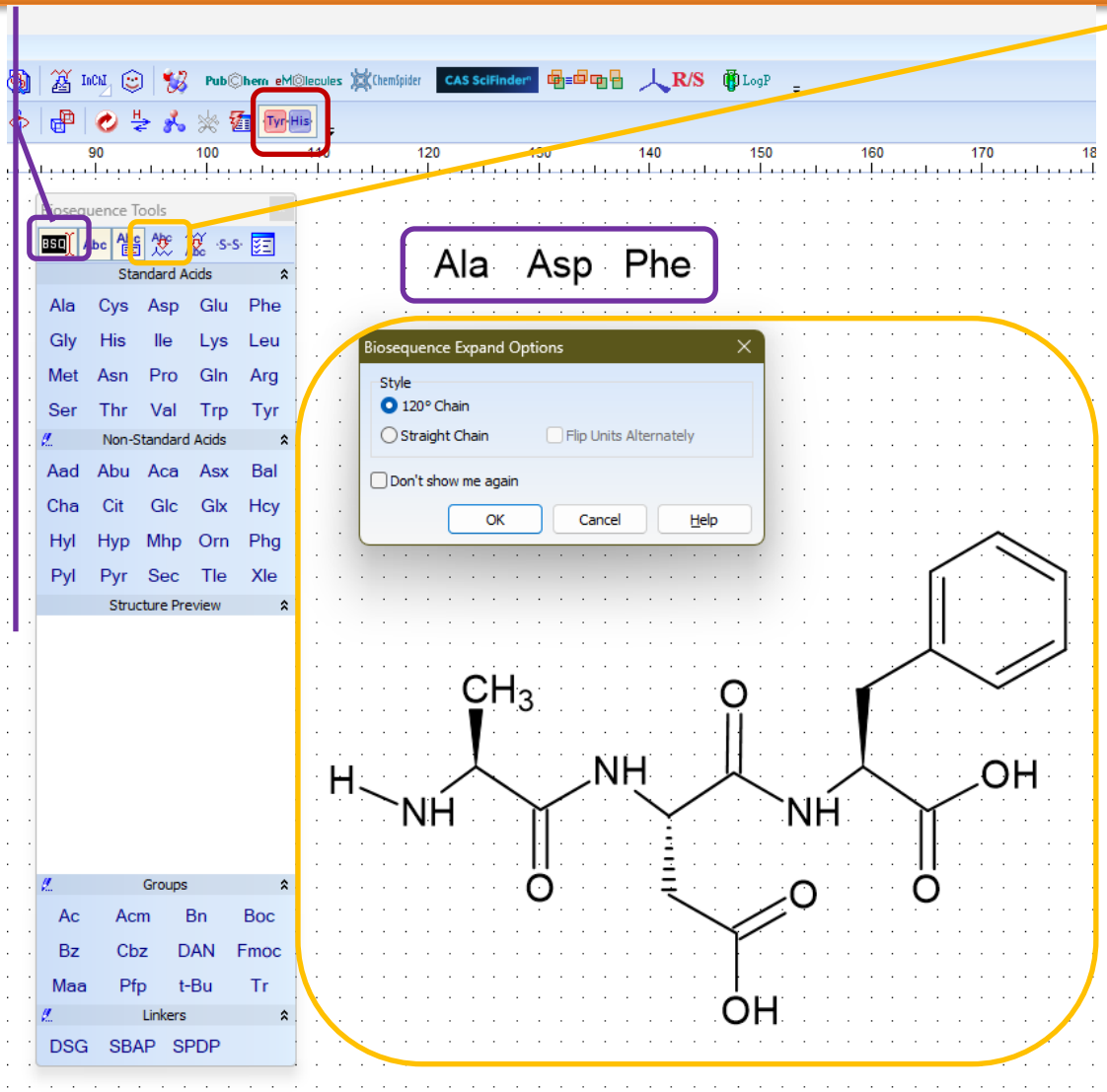
Check tautomeric forms



Narzędzie tworzy wszystkie możliwe tautomery dla danej struktury i wskazuje najbardziej prawdopodobną z nich

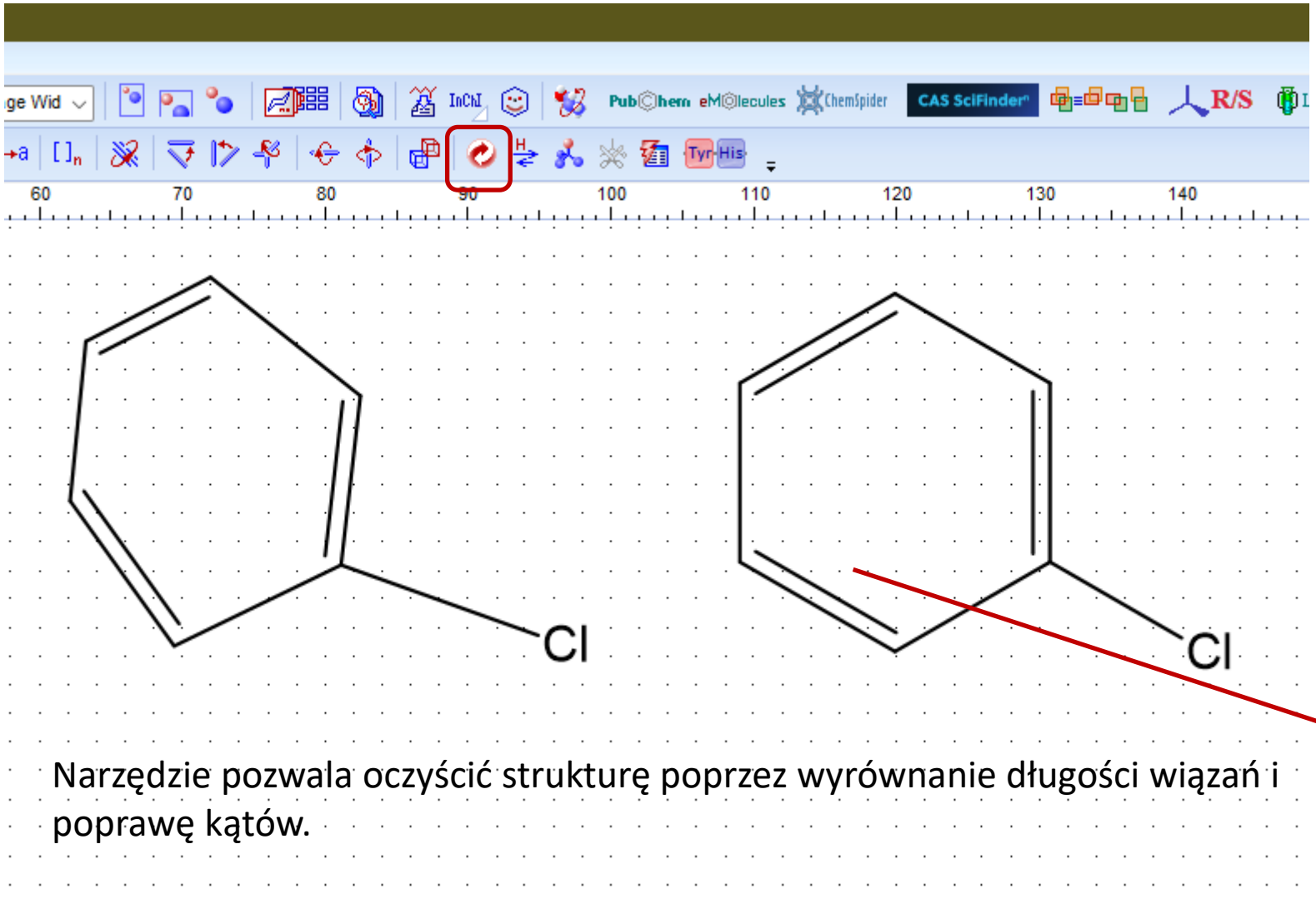
Biosequence Tools

Narzędzie pozwala tworzyć wzory polipeptydów przez wpisywanie symboli (litery lub skróty 3 literowe) kolejnych aminokwasów.



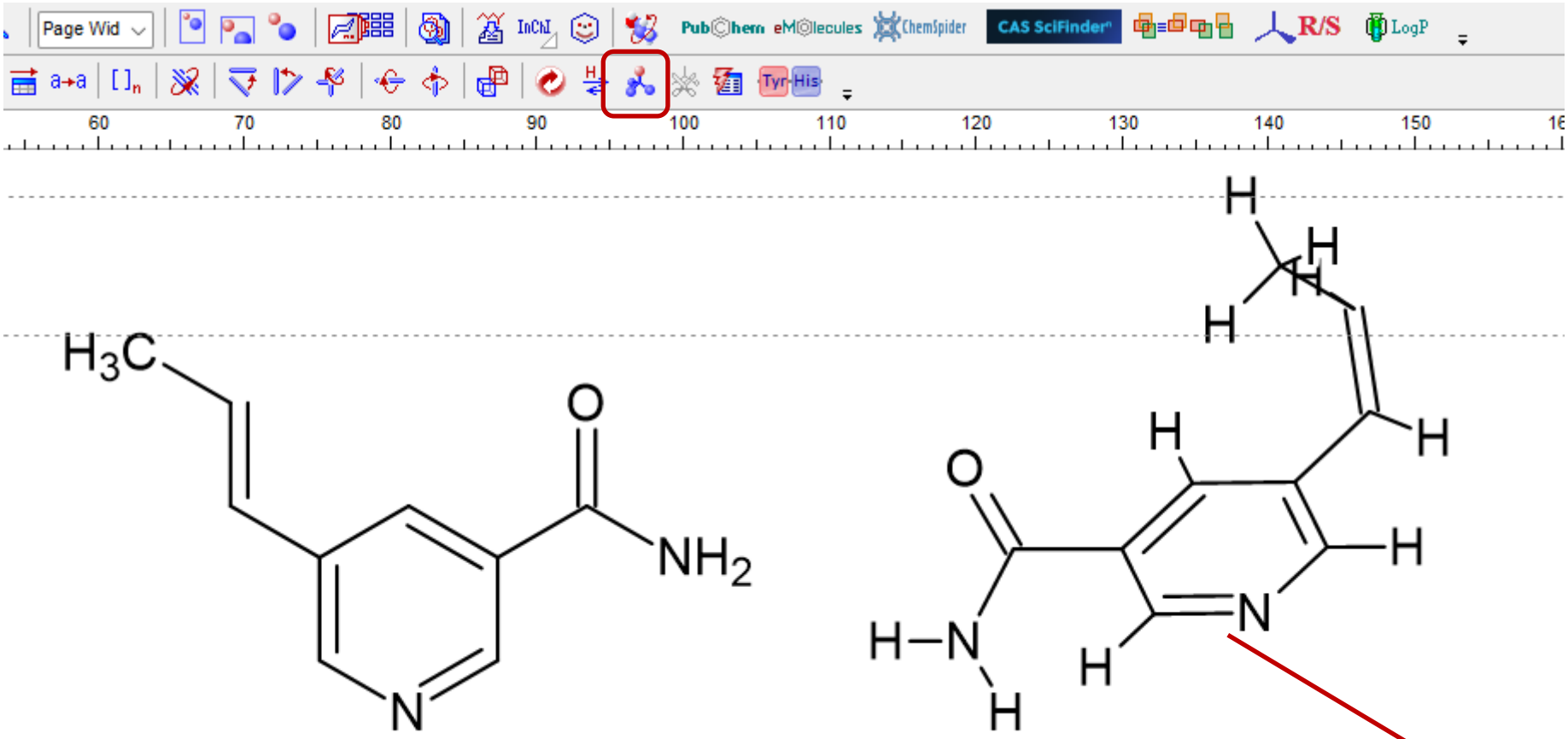
Narzędzie pozwala generować z zapisu liniowego wzór półstrukturalny.

Clean Structure



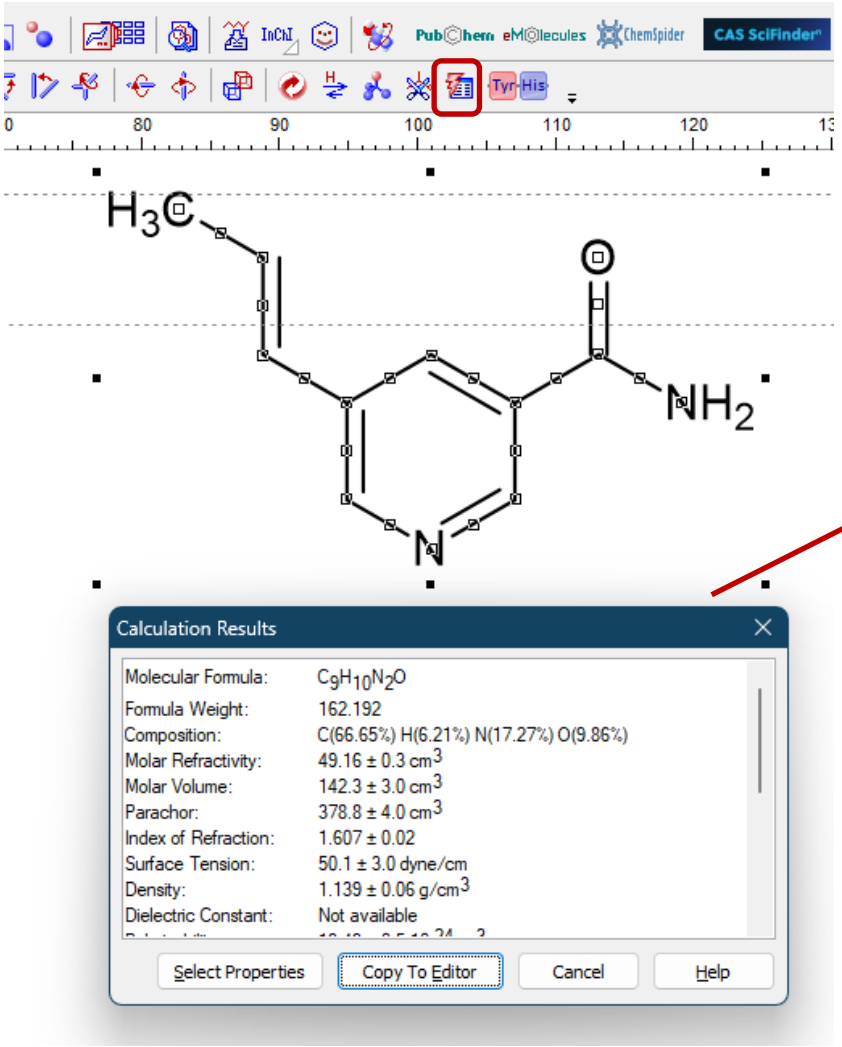
Narzędzie pozwala oczyścić strukturę poprzez wyrównanie długości wiązań i poprawę kątów.

3D optimization



Narzędzie pozwala zoptymalizować przestrzenny rozkład atomów w zadanej strukturze.

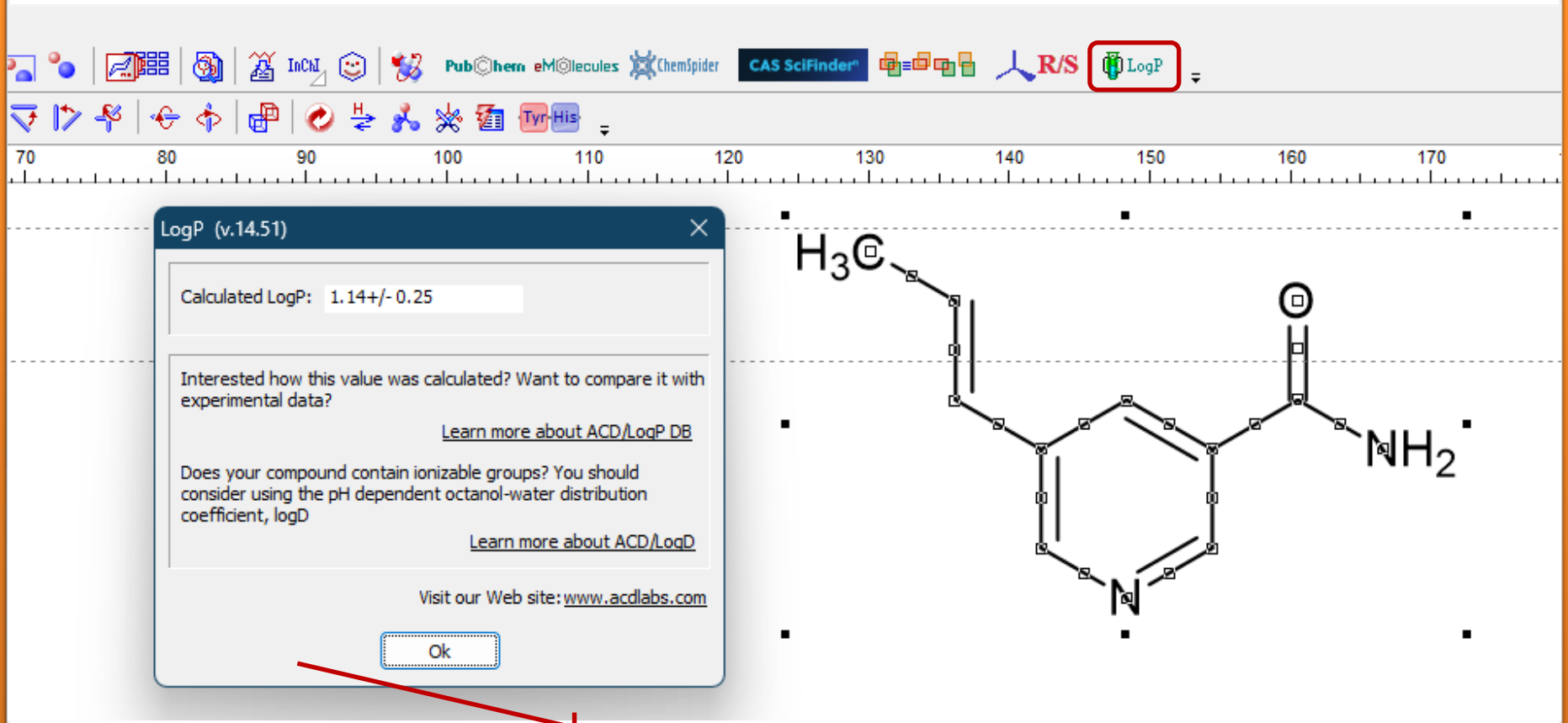
Calculate Selected Properties



Narzędzie oblicza wybrane właściwości dla wskazanej struktury

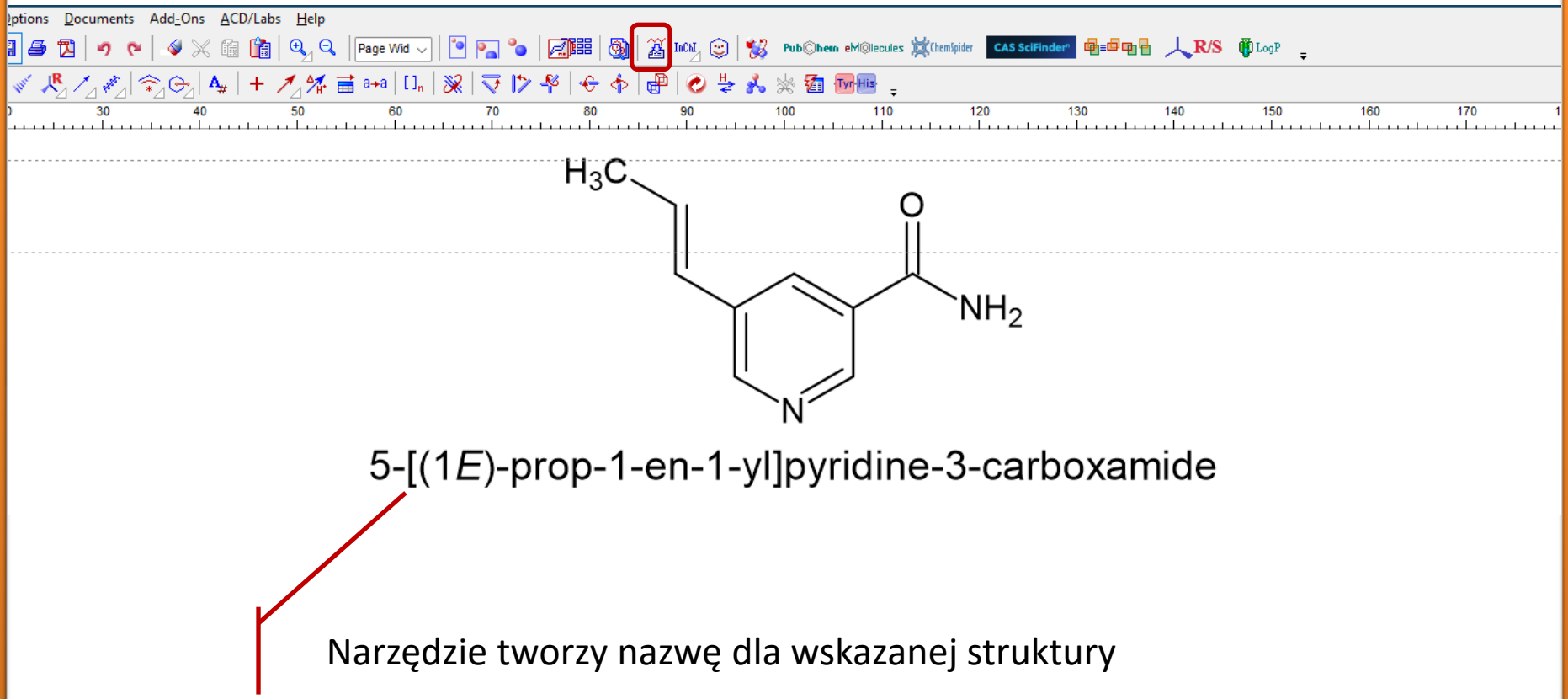
Calculate logP

Log(P) – logarytm dziesiętny ze współczynnika podziału danej substancji pomiędzy oktanol i wodę.



Narzędzie oblicza log(P) dla wskazanej struktury

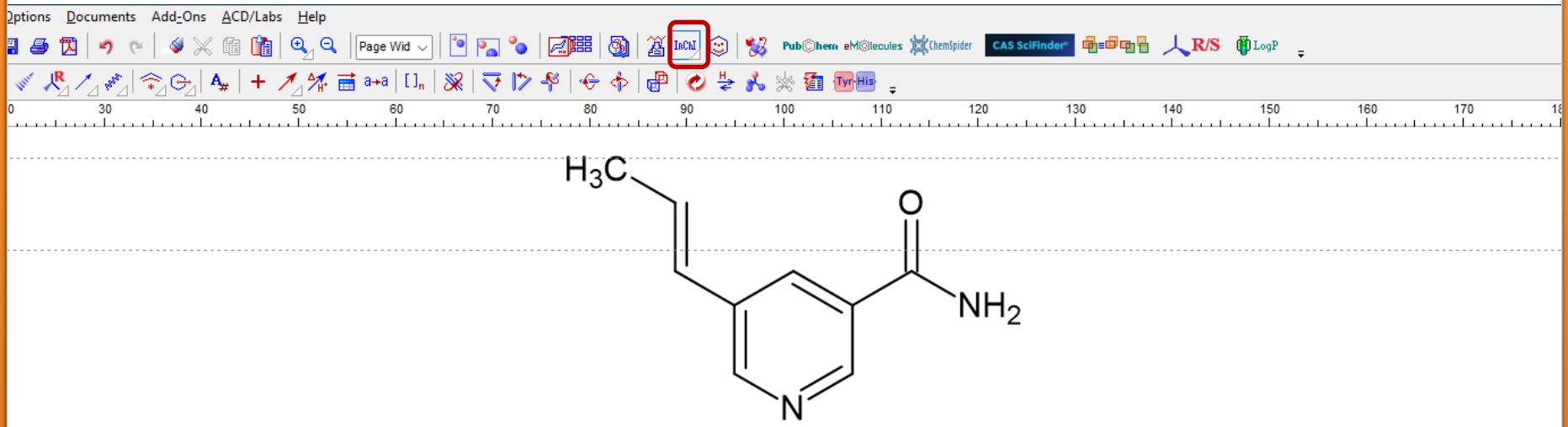
Generate name for structure



Narzędzie tworzy nazwę dla wskazanej struktury

InChI for structure

InChI (ang. International Chemical Identifier) – identyfikator stosowany dla substancji chemicznych, wprowadzony w 2005 roku przez IUPAC.

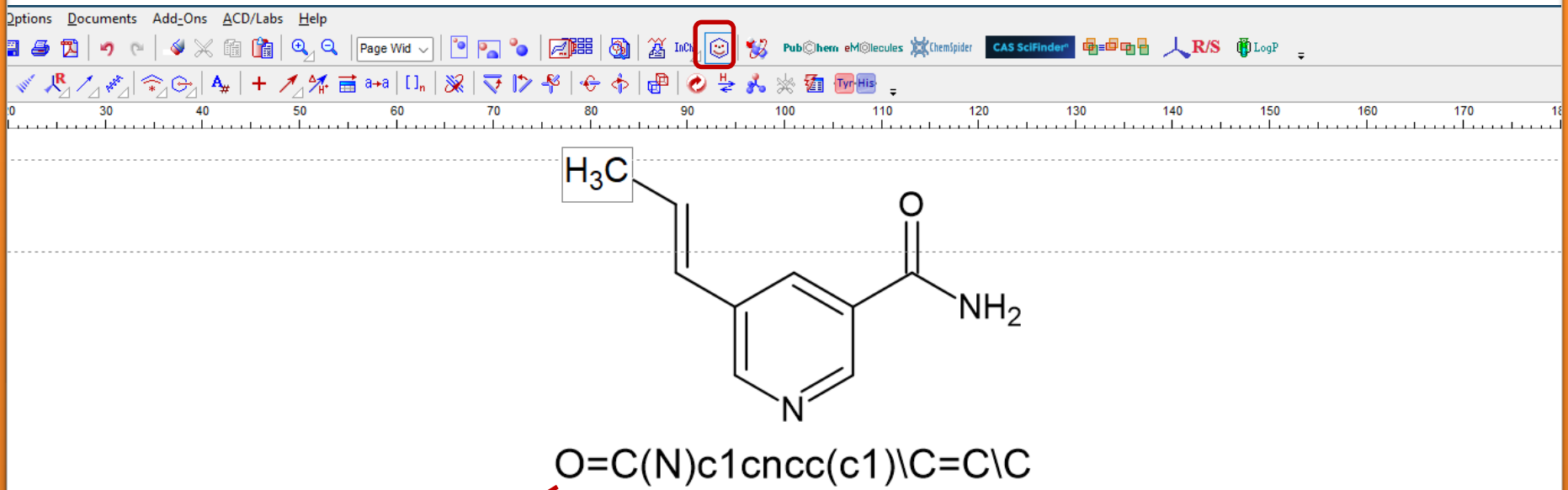


InChI=1S/C9H10N2O/c1-2-3-7-4-8(9(10)12)6-11-5-7/h2-6H,1H3,(H2,10,12)/b3-2+

Narzędzie tworzy InChI dla wskazanej struktury

SMILES notation

SMILES (ang. Simplified Molecular Input Line Entry Specification) – sposób jednoznacznego zapisu struktury cząsteczek związków chemicznych z wykorzystaniem ciągu znaków ASCII.



Narzędzie tworzy zapis SMILES dla wskazanej struktury

Koniec