***ChemDraw***

1. Намалювати 5 структур у 2D у ChemDraw і зберегти кожну окремо з .cdx - розширенням (файл ChemDraw), та у форматі малюнків вставити у звіт.

2. Розрахувати для кожної структури аналітичні (Analysis window) та хімічні властивості (chemical propertis window).

3. Зробити загальну аналітичну табличку зі структурами (зверху вниз у стовпчик структури) і їх властивостями.

4. Надати переклад і коротку характеристику кожної з прорахованих властивостей

5. За допомогою програми ChemDraw дати назви для всіх 5 сполук.

6. Спрогнозувати для всіх 5 сполук ЯМР-спектри (1Н та 13С).

7. За допомогою Chem3D Ultra 8.0 отримати а) 3D-формули для 5 сполук та
б) за допомогою 5 математичних пакетів для квантово-хімічних розрахунків (MM2, Gamess, Gaussian, Mechanics, MOPAC) розрахувати мінімальну енергію. Данні з завдання 3-б, об'єднати в одну загальну таблицю. в) записати анімацію для однієї структури (її розмістите у мудл, або надішліть на пошту kornetmaryna@ukr.net).

***Chemsketch***

<https://www.acdlabs.com/resources/freeware/chemsketch/download.php>

а) Намалювати всі 5 структур у 2D-форматі.

б) Дати назви цим структурам

в) Зробити розрахунки аналітико-хімічних властивостей для них (Tools-Calculate-All properties), розшифрувати  параметри та дати їм коротку характеристику.

г) Розрахувати для них LogP

д) Розрахунки представити в двох форматах скіншот (на якому форула, назва, розрахунки) і окремо об'єднані в загальну таблицю результати.

ж)  Намалювати всі 5 структур у 3D-форматі, зробити їх скіншоти

***Molinspiration***

<https://www.molinspiration.com/>

а) Уважно ознайомитися з можливостями програми.

б) Намалювати всі 5 структур у 2D-форматі.

в) Дати назви цим структурам

г) Зробити всі можливі розрахунки за допомогою цієї програми (як аналітико-хімічні властивості так і біологічні), розшифрувати  параметри та дати їм коротку характеристику.

д) Розрахунки представити в двох форматах скіншоти (на якому формула, назва, розрахунки) і окремо об'єднані в загальну таблицю результати.

ж)  Намалювати всі 5 структур у 3D-форматі зробити їх скіншоти.

***PASSonline***

<http://www.way2drug.com/PASSOnline/predict.php>

а) Для прогнозування можна використовувати mol-файли (які можна отримати у попередній програмі, або за допомогою або намалювати структуру у marvin JS), зробити скіншот структури.

б) Зробити прогноз біологічного потенціалу структури, його результати в повному об’ємі внести до звіту.

***GUSARonline***

[*http://www.way2drug.com/gusar/*](http://www.way2drug.com/gusar/)

а) Намалювати структури у додатку, зробити їх скіншоти.

б) Зробити прогноз їх токсичності по відношенню до щурів (**Acute rat toxicity prediction)** та оточуючого середовища (**Environmenta**l), результати відобразити у звіті у повному обсязі.