

ACD/CHEMSKETCH

Osnovno korištenje

ChemSketch

ChemSketch tvrtke *Advanced Chemistry Development* je besplatni edukativni program za crtanje kemijskih struktura i laboratorijskih shema i dijagrama.

ChemSketch se može preuzeti uz besplatnu registraciju. Možete koristiti bilo koju e-mail adresu, a za ustanovu je dovoljno napisati "*Faculty of Science*":

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

Nakon preuzimanja program se jednostavno instalira.

Nešto opširniji uvod u korištenje može se preuzeti **OVDJE**.

VAŽNO: Ova verzija *ChemSketch* radi isključivo s 64-bitnim Windowsima. Ukoliko imate starije ili 32-bitne Windowse, ili imate drugih problema s najnovijom verzijom, možete preuzeti stariju i gotovo jednako funkcionalnu verziju **OVDJE**. Za korisnike MAC računala *ChemSketch* je moguće koristiti uz upotrebu virtualizacije prema uputama na YouTube kanalu proizvođača: <https://www.youtube.com/watch?v=l4hgrJGbJNY>

Od osnovnih mogućnosti ističe se: crtanje 2D i 3D struktura molekula (u načinu rada **STRUCTURE**); optimizacija struktura (ugrađenim metodama molekularne mehanike); završna obrada struktura i shema mehanizama reakcija odnosno dodavanje raznih grafičkih elemenata (u načinu rada **DRAW**); crtanje različitih dijagrama, shema reakcija, te aparatura. Strukture je moguće pregledavati u 3D pregledniku (**3D Viewer**), te ih exportirati (spremati) u različitim visokokvalitetnim (vektorskim) grafičkim formatima, ili formatima koji se mogu otvoriti i u drugim aplikacijama (npr. Word ili PowerPoint).

Načini rada

ChemSketch može funkcionirati na dva načina (*moda*). Osnovni način rada je **STRUCTURE**, u njemu se nacrtane strukture obrađuju na kemijski način, odnosno program razlikuje pojedine kemijske elemente, te u većini slučajeva automatski usklađuje nacrtanu strukturu s njihovim kemijskim svojstvima, npr. automatski dodaje vodikove atome tamo gdje "nedostaju".

Dva načina rada razlikuju se i po skupu dostupnih "alata" (ikona).

Bez obzira na način rada, dostupna su naprednija grafička podešenja za sve vrste oblika i tekstove (font - vrsta i veličina), a svim elementima moguće je promijeniti i boju (čiste boje, uzorci, gradijenti ...)

Structure

Dostupni su alati i izbornici koji olakšavaju crtanje molekule

Alati su raspoređeni u tri horizontalne trake (gore) i jednu vertikalnu (lijevo):

- traka s izbornicima - osnovne naredbe vezane uz rad programa
- traka s izdvojenim alatima za upravljanje datotekom
- traka s alatima za upravljanje strukturom
- vertikalna traka s alatima za crtanje strukture

Tooltip (opis alata) pojavljuje se pokraj kursora ako se isti postavi na ikonu alata bez klikanja.

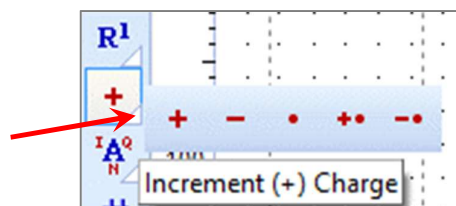
Draw

Dostupni su alati i izbornici koji omogućuju crtanje dodatnih grafičkih elemenata na postojeću strukturu (strelice, velike zagrade i sl.), te alati za crtanje aparatura.

Prva i druga horizontalna traka zajedničke su u oba načina rada

- traka s alatima za upravljanje položajem strukture
- vertikalna traka s alatima za crtanje s osnovnim grafičkim elementima

VAŽNO! Klikom na trokut u donjem desnom kutu pojedinih ikona otvaraju se dodatni alati.



Template window

U program su ugrađeni brojni predlošci (templates) do kojih se dolazi klikom na izbornik *Template* $\Rightarrow$ *Template window* (ili tipkom F5). Lijeva strana popunjena je često korištenim grupama predložaka (*Alcaloids*, *Carbohydrates*, *DNA/RNA kit*, ...), no to NISU SVI dostupni predlošci. Do dodatnih (grupa) predložaka dolazi se odabirom grupe i podgrupe sa padajućih izbornika (gornja traka).

Spremanje i izvoz

Najjednostavniji način spremanja strukture ili crteža je kao ChemSketch 2.0 Document (*.sk2). Dokument spremljen na taj način ponovo se može otvoriti u programu ChemSketch. Osim toga, postoji mogućnost izvoza u druge grafičke tipove datoteka od kojih treba izdvojiti Windows metafile, *.wmf (vektorski oblik), te *.png (rasterski oblik). Pri izvozu u *.png format pojavljuje se mogućnost odabira rezolucije (kliknuti na options) gdje treba odabrati rezoluciju od najmanje 300 dpi. tako spremljena slika može se koristiti u bilo kojem drugom programu (npr. MS Word, MS PowerPoint...).

3D preglednik

U načinu rada *structure* nacrtanu strukturu potrebno je optimizirati. Označi se čitava struktura i klikne na ikonu 3d optimization. Nakon što je struktura optimizirana moguće ju je otvoriti u 3D pregledniku klikom na ikonu 3D Viewer.

Unutar preglednika strukturu je moguće rotirati oko svih osi, te mijenjati način prikaza (*wireframe, sticks, balls and sticks, spacefill, dots only, disks*; a svaka opcija može uključivati dodatno i *dots*). Rotirajuću strukturu moguće je spremiti kao "Animated gif" (*.gif), što se može iskoristiti u PowerPoint prezentacijama ili na web stranicama. Prije spremanja ovakvog filma potrebno je kreirati frameove, te definirati osnovne postavke (klikom na Tools $\Rightarrow$ AutoAddFrames). Osim ovih postavki, postoji i *Animation Interval*, te *Loop* kao opcije samog GIF tipa datoteke. Pravilnom kombinacijom tih postavki (metodom pokušaja i pogrešaka) može se dobiti kvalitetan film. Ovdje je važno napomenuti da se boja pozadina može promijeniti, te da ju je dobro promijeniti u boju pozadine PowerPoint prezentacije u koju animacija ide. 3D strukture spremaju se kao ACD 3D Document (*.s3d).

Metode optimizacije molekulskih struktura

Inicijalno nacrtana struktura neke molekule, koliko god se trudili, uglavnom nije u skladu sa stvarnim 3D izgledom molekule (duljine veza i kutevi između njih).

Premda je poznato da atomi unutar molekula nisu nepomični, postoji određeni položaj u kojemu molekula odn. struktura ima nekakvu minimalnu energiju. Računalnim putevima moguće je (čak i bez eksperimentalnih podataka) odrediti strukturu nepoznate molekule. To je predmet istraživanja računalne kemije (*computation chemistry*). Razvijene su razne metode koje se koriste u računalnoj kemiji.

O odabiru metode ovisi točnost, ali i brzina dobivanja rezultata. Zahtjevnije metode koje koriste kvantno-mehaničke modele mogu mjesecima raditi na optimizaciji jedne jedine molekule nekog proteina, čak i na snažnim računalima. U uvodnom dijelu spomenuta je molekularna mehanika kao metoda optimizacije strukture. Radi se o najmanje zahtjevnoj metodi koja ne koristi kvantnu mehaniku, nego klasičnu, tako da se relativno brzo, čak i sa molekulama od nekoliko tisuća atoma mogu dobiti zadovoljavajući rezultati (može se koristiti u svrhe ilustracija i sl., ali ipak ne i u ozbiljnijem modeliranju).

Metode optimizacije energije mogu se podijeliti na sljedeći način:

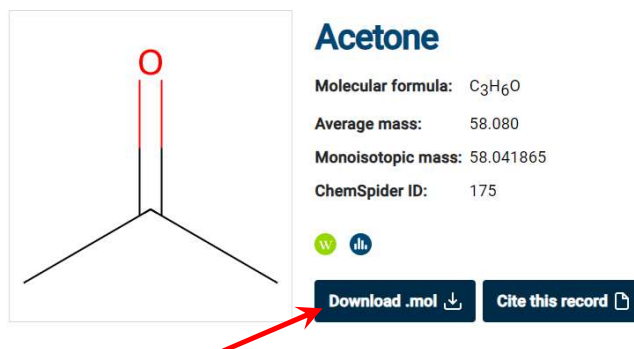
- *Ab initio*, (iz početka, *Lat.*) metodama struktura molekule računa se samo i isključivo korištenjem Schroedingerove jednačbe.
- Semi-empirijske tehnike također se oslanjaju na matematičke metode, no uz primjenu aproksimacija dobivenih iz eksperimentalnih podataka
- Molekularna mehanika koristi klasičnu fiziku kako bi interpretirala ponašanje atoma i molekula

Zadaci

- 1) "Slobodnom rukom" nacrtajte u STRUCTURE načinu molekulu **benzena bez upotrebe predložaka**. Optimizirajte strukturu klikom na ikonicu *3D optimization* (🔗) i zatim prikažite u 3D pregledniku (🔗) kao "balls and sticks, with dots". Dodajte frameove animacije (*Tools* ⇒ *Auto Add Frames*; ili najdesnija ikona) "Suvišni" atomi vodika mogu se ukloniti klikom na **Tools** → **Remove explicit hydrogens**. Spremite animaciju kao **Animated GIF**, te ju umetnite u praznu PowerPoint prezentaciju. Uočite da postoji mogućnost odabira boje pozadine gif-a, no pozadina ne može biti prozirna.
- 2) U DRAW načinu, koristeći dostupne predloške (templates: grupa: *Lab Kit*; podgrupa: *Apparatus 1* ili *Apparatus 2*) pronađite aparaturu za destilaciju i spremite sliku kao "destilacija" u formatu datoteke PNG (prije spremanja slike podesite rezoluciju na 300 dpi). Sliku umetnite na drugi slide PowerPoint prezentacije.
- 3) Pronađite u predlošcima i umetnite u sljedeći slide sljedeće elemente:
 - a) **Methionyl (Met) radikal** (grupa: *amino acids*; podgrupa: *radicals*)
 - b) **Vitamin B₂ (Riboflavin)**

PAZI: kopiranje iz ChemSketch aplikacije radi se pomoću izbornika EDIT → COPY, jer desni klik mišem ima druge funkcije. Prije kopiranja, željenu strukturu treba selektirati/označiti.

- 4) U bazi Chempider pronađite molekulu po izboru i spremite njenu **strukturu** (NE sliku) na računalo (prva ikonica lijevo ispod slike). Spremljena datoteka bi trebala imati nastavak .mol (na nekim računalima nastavak datoteke nije vidljiv, no to nije problem)



Otorite navedenu datoteku u Chemskech (File → Open ...), zatim ju prenesite u 3D viewer, te odaberite 3D prikaz i orijentaciju po želji. Prilikom spremanja datoteke iz baze Chempider obratite pažnju KAMO se datoteka sprema i pod kojim imenom!

NEMOJTE 2X kliknuti na datoteku jer bi se mogla otvoriti u nekom drugom programu!

Sliku izvezite i umetnite u vašu prezentaciju.