

Guida Introduttiva a ChemSketch e 3D Viewer

A. Introduzione

Lo scopo di questo manuale è quello di introdurre i programmi ChemSketch e 3D Viewer, appartenenti al gruppo ACD Labs (Advanced Chemistry Development). ChemSketch è un programma gratuito che ci consente di disegnare molecole in 2D, assegnargli un nome, ricavarne le proprietà e molto altro. 3D Viewer consente, invece, di visualizzare le molecole precedentemente disegnate in ChemSketch nello spazio tridimensionale (3D).

B. Installare ChemSketch

Le caratteristiche base descritte in questa guida fanno riferimento all'ultima versione disponibile del programma (novembre 2016).

Il programma è compatibile solo con il sistema operativo Windows. Per computer Mac si consiglia di visionare le note relative alla pagina web:

<http://www.acdlabs.com/resources/freeware/chemsketch/>.

Registrazione. Prima di scaricare ChemSketch è necessario registrarsi come utente al sito web: <http://www.acdlabs.com>. Aperta la pagina web <http://www.acdlabs.com>, è necessario selezionare dal menù **Register**. Apparirà un documento elettronico dove si dovranno inserire i propri dati personali, il proprio indirizzo e-mail ed una password. Terminata l'operazione si dovrà selezionare il tasto **Register** per inoltrare il documento di registrazione. Successivamente, si riceverà un messaggio all'indirizzo e-mail indicato contenente un codice (code) richiesto al primo **Login** per l'attivazione dell'account. La registrazione è necessaria per il download del programma.

Download. Il programma può essere scaricato (download) collegandosi al seguente indirizzo:

<http://www.acdlabs.com/resources/freeware/>

selezionando il tasto Download corrispondente al software ACD/ChemSketch Freeware.

Per effettuare il download sarà necessario immettere il proprio indirizzo e-mail e la password che si è precedentemente fornito nel documento di registrazione. Si arriverà quindi al documento di licenza di accordo dove a fondo pagina deve essere selezionato il pulsante **I ACCEPT**. Si procede a questo punto a scaricare il programma selezionando il file compresso .zip ACDLabs20162_ChemSketchFreeware_FInstall salvandolo sul nostro computer.

Installazione. Salvato il file .zip sul computer, sarà necessario cliccare due volte sul nome dell'archivio e quindi avviare la procedura di installazione del programma con un doppio clic del file .exe (n.b. prima di procedere con l'installazione del programma si raccomanda di chiudere tutti i programmi aperti in Windows). Si segue, quindi, la procedura guidata.

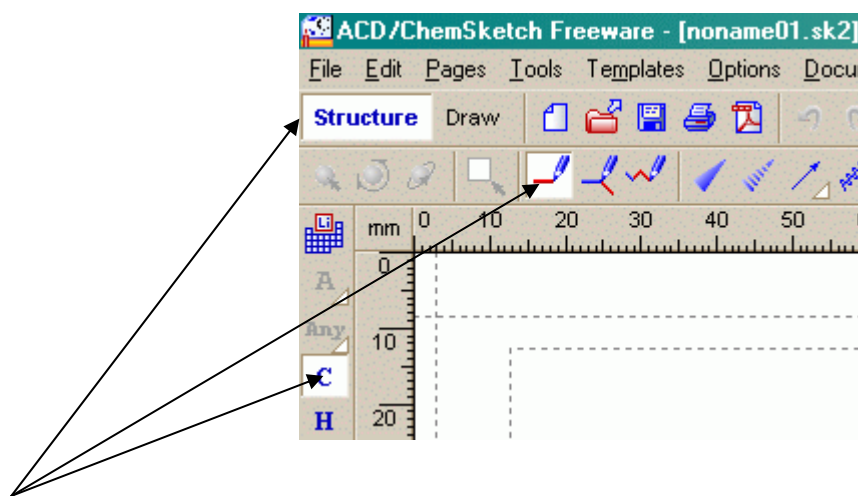
Durante il processo di installazione ChemSketch, 3D Viewer ed i loro rispettivi manuali verranno salvati sul computer.

C. Disegnare in ChemSketch


1. Aprire il foglio di lavoro in ChemSketch

Aprire ChemSketch (selezionando il programma dalla lista dei programmi del computer). Nella versione gratuita del programma si aprirà la finestra **ACD/Labs Products**, cliccando su **OK** verrà chiusa e si potrà procedere. Se non vogliamo più vedere questa finestra in futuro iniziando il programma, dal menù cliccare su **Help** scegliere **ACD/Labs Products** e deselezionare la casella **Show This Screen at Startup** presente nella finestra in basso a sinistra.



Appena aperto ChemSketch, il foglio di default si presenta in questo modo:



tre icone della barra degli strumenti sono illuminate (questo indica che sono selezionate). L'icona caratterizzata dalla lettera **C** (simbolo del Carbonio) sta ad indicare che l'atomo selezionato è il

Carbonio, mentre l'icona , raffigurante una matita (chiamato **Draw Normal**), è il pulsante che dobbiamo selezionare quando vogliamo disegnare una molecola. Le due icone sono visibili solo quando il tasto **Structure**, nell'angolo della pagina in alto a sinistra, è acceso.

Per iniziare a disegnare la nostra molecola basterà posizionare il puntatore su un qualsiasi punto del foglio di lavoro e cliccare su di esso con il pulsante sinistro del mouse. Apparirà un atomo di Carbonio che per default sarà legato a 4 atomi di idrogeno (CH_4). Per aggiungere un altro atomo di Carbonio al CH_4 già presente sul foglio di lavoro basterà cliccare sulla molecola di CH_4 . E' semplice vedere dove il pointer è posizionato in quanto apparirà un riquadro rettangolare attorno all'atomo/legame scelto.

Affiancate alla icona del comando **Draw Normal** ci sono altre due icone, relative rispettivamente al comando **Draw Continous**  e **Draw Chains** . Il comando **Draw Continous** è utile quando si vogliono aggiungere dei sostituenti su un dato atomo. In questo caso si dovrà selezionare l'atomo che si vuole sostituire e successivamente cliccare sull'atomo che dovrà portare quel sostituente tante volte quanti sono i sostituenti che si vogliono aggiungere. Per passare dal modo **Draw Normal** al modo **Draw Continous** e viceversa basta fare click sul pulsante destro del mouse. Il comando **Draw Chains** è utile, invece, per disegnare catene. In questo caso dopo aver selezionato l'icona **Draw Chains** si clicca sul foglio di lavoro e si trascina il mouse. Durante il trascinarsi verrà disegnata una catena di atomi con legami a 120° la cui lunghezza è indicata da un indicatore che specifica il tipo ed il numero di atomi inseriti nella catena. Se durante il trascinarsi si tiene premuto il tasto CTRL gli atomi nella catena avranno legami a 180° .

2. Eliminare un atomo o un legame

In caso di errore possiamo cancellare l'atomo od il legame impropriamente aggiunto selezionando



l'icona **Delete**. Si posiziona il cursore sull'elemento che vogliamo rimuovere e si clicca su di esso con il tasto sinistro del mouse. Se si cancella il penultimo atomo di C di una catena verrà cancellato anche l'ultimo mentre se si tiene premuto il tasto CTRL la catena verrà spezzata in due. Se l'atomo cancellato si trova in un punto centrale della catena (che non sia il penultimo) la catena verrà spezzata in due.

3. Introdurre un doppio o triplo legame

Per disegnare molecole con un doppio legame la strategia più comune è solitamente quella di disegnare la molecola utilizzando legami singoli, posizionare poi il puntatore sul legame che vogliamo trasformare in doppio o triplo e cliccare su di esso, una volta o due con il tasto sinistro del mouse. Il legame singolo si convertirà rispettivamente in doppio e triplo. Tutte le volte che si clicca sul legame il numero di legami tra i due atomi aumenterà da singolo a doppio a triplo, o cambierà da triplo a singolo nuovamente.

4. Introdurre Eteroatomi



Se vogliamo disegnare molecole contenenti eteroatomi (atomi diversi da Carbonio o Idrogeno), la strategia migliore è quella di disegnare la molecola contenente solo atomi di carbonio e cambiare poi l'atomo di carbonio voluto con l'eteroatomo. Per far questo, dopo aver disegnato la molecola, basterà selezionare l'icona dell'eteroatomo che vogliamo introdurre dalla barra degli strumenti presente sul lato sinistro del foglio di ChemSketch, posizionare il puntatore sull'atomo di carbonio che vogliamo sostituire e cliccare poi sul tasto sinistro del mouse. Se l'eteroatomo che vogliamo introdurre non è presente sulla barra degli strumenti di sinistra, dobbiamo includerlo selezionando



l'icona posizionata in cima alla barra degli strumenti a sinistra **Periodic Table of Elements**, corrispondente alla tavola periodica degli elementi. Dopo aver cliccato sull'icona si aprirà una tavola periodica dove si potrà selezionare l'atomo voluto premendo il tasto sinistro del mouse (l'elemento si illuminerà dopo essere stato selezionato). Da notare che dopo aver selezionato un elemento appariranno in alto nella stessa finestra informazioni riguardanti il suo stato di ossidazione, la sua configurazione elettronica, la massa, ed il suo numero atomico. In basso, nella stessa finestra, sono disponibili ulteriori informazioni attraverso le opzioni: **General, NMR, Mass e Coloration**.

Dopo aver selezionato l'elemento voluto dobbiamo selezionare il tasto **OK** per poter inserire lo stesso elemento sul foglio di lavoro. Dopo aver effettuato questa operazione l'elemento scelto apparirà anche sulla barra degli strumenti laterale di sinistra.


5. Correzione della geometria della molecola

Per correggere la geometria di una molecola si può procedere in due modi, il manuale e l'automatico. Nel modo manuale si seleziona la prima icona in alto a sinistra **Select/Move** , si cliccano e si trascinano gli atomi da correggere in una nuova posizione fino ad ottenere la geometria voluta. Nel modo automatico si può selezionare dal menù **Tools** il comando **Clean Structure**, oppure si può selezionare dalla barra degli strumenti in alto l'icona  (corrispondente al

comando **Clean Structure**). Il programma ridisegna la molecola utilizzando valori di lunghezze ed angoli di legame standard.





6. Pulire il foglio di lavoro

Si può fare in diversi modi:



- dal menù **Edit** selezionare **Select All** (tutto ciò che è disegnato sul foglio di lavoro verrà selezionato) e, sempre dal menù **Edit**, selezionare **Delete** oppure premere il tasto **Canc** (cancella).
- premere CTRL+A per selezionare tutto e quindi premere **Canc** (cancella). Se si vuole deselegionare, è sufficiente posizionarsi in un punto pulito del foglio e cliccare il tasto destro del mouse.
- scegliere **Delete**  dal **General Toolbar** (menù in alto), quindi cliccare su un punto pulito del foglio di lavoro, tutte le strutture verranno selezionate, a questo punto cliccare su una qualsiasi delle strutture e tutto il foglio verrà pulito.


7. Come muovere la molecola disegnata



Spostare un atomo o una molecola

Un atomo o una molecola possono essere spostate/ruotate utilizzando le icone:  in alto a sinistra della barra degli strumenti. Per spostare un atomo della nostra molecola da una posizione ad un'altra si seleziona l'icona **Select/Move** , si porta il cursore sull'atomo, si clicca con il pulsante sinistro, si trascina il mouse in una nuova posizione e si rilascia. L'atomo verrà spostato nella nuova posizione. Per ruotare la molecola sul piano del foglio di lavoro selezionare il pulsante **Select/Rotate/Resize**  e spostare il puntatore su un atomo o un legame della molecola stessa. Mantenendo premuto il pulsante sinistro del mouse e muovendolo in senso rotatorio sarà possibile ruotare l'intera molecola di un angolo qualsiasi compreso tra 0° - 360° . Con entrambi i pulsanti appena visti è possibile anche selezionare l'intera molecola. Tenendo premuto il pulsante sinistro del mouse in un punto esterno alla molecola trascinare in modo tale che il rettangolo che appare contenga l'intera molecola. Rilasciando il mouse l'area che contiene la molecola sarà descritta da alcuni punti. Se il comando **Select/Rotate/Resize** è selezionato è possibile cambiare le dimensioni della molecola puntando il mouse su uno di questi punti e tenendo premuto il pulsante sinistro trascinare verso l'interno (rimpicciolimento) o verso l'esterno (ingrandimento). La molecola potrà essere ruotata in uno spazio 3D selezionando l'icona **3D Rotation**  e procedendo come nei precedenti casi (puntare su un atomo/legame, cliccare con il sinistro, muovere il mouse).

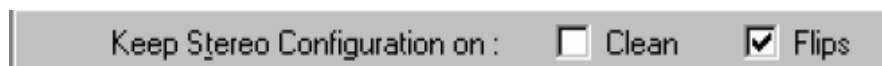
Muovere l'intera molecola rispetto ad un legame

La molecola può essere ruotata in modo tale che un certo legame sia posizionato orizzontalmente o verticalmente. Questo può essere fatto cliccando rispettivamente sull'icona **Set Bond Horizontally**  e sull'icona **Set Bond Vertically** . Per applicare l'operazione, dopo aver selezionato l'icona appropriata, cliccare sul legame scelto, l'intera molecola verrà spostata opportunamente.

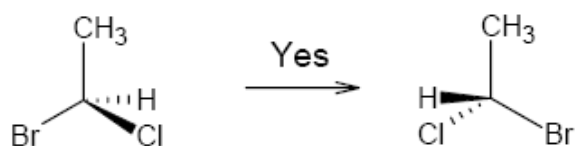
L'intera molecola può poi essere ruotata di 180° rispetto ad un legame selezionando l'icona **Flip on Bond**  e cliccando sul legame scelto. Inoltre, può essere ruotata da sinistra a destra e viceversa

selezionando l'icona **Flip Left to Right**  o alto basso e viceversa selezionando l'icona **Flip Top to Bottom** .

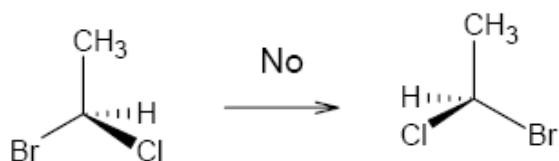
n.b. Quando si applicano i comandi **Flip** la configurazione sterica potrebbe cambiare. Per evitare ciò dal menù **Options** scegliere **Preferences**, quindi cliccare su **Structure** nella finestra di dialogo e selezionare la casella **Keep Stereo Configuration on**.



in modo tale che la molecola prima e dopo l'operazione sia la stessa nonostante la diversa rappresentazione.



Nel caso in cui questa casella non sia selezionata le molecole prima e dopo l'operazione di Flip sono enantiomeri.



8. Come salvare il disegno fatto.


Il disegno può essere salvato scegliendo dal menù **File** l'opzione **Save as** (salva con nome), quindi il percorso di salvataggio ed il nome del file. Verrà salvato un file del tipo .sk2.

E' interessante notare che il programma consente di creare e quindi gestire più pagine di lavoro nello stesso documento .sk2. Per aggiungere una nuova pagina è sufficiente scegliere l'opzione **New** dal menù **Pages** nella barra principale di comandi.


Nell'angolo in basso a sinistra è indicato il nome del documento e a fianco l'indicazione delle pagine.

Si può salvare il file anche nel formato molfile .mol. In questo formato verrà salvata solo la struttura mentre eventuali grafici o testo verranno persi. Selezionare la struttura che vogliamo salvare come molfile e dal menù **File** scegliamo **Export**. Nella casella **Save As Type**, selezionare **MDL Molfiles (*.mol)**. Specificare la locazione ed il nome del file.



9. Come stampare il disegno fatto.

Dal menu **File** scegliere **Page Setup** e impostare le opzioni desiderate. Cliccando su **Full Page**  verrà visualizzata la pagina, effettuare eventuali cambiamenti e dal menù **File** scegliere **Print**.

10. Inserire la struttura in un file word.

La struttura disegnata va evidenziata e copiata usando l'icona **Copy** , o scegliendo **Copy** dal menù **Edit** o premendo CTRL+c. Quindi si incolla nel file (Word, Excel...). Per consentire le modifiche sulla struttura importata in un file word scegliere l'opzione Incolla Speciale (quindi


importare il file nel formato di ChemSketch .sk2). Con un doppio click sulla struttura questa verrà automaticamente aperta in Chem Sketch.

n.b. Per evidenziare la struttura ci sono diversi modi come abbiamo già visto. Se sul foglio di lavoro sono presenti più strutture e ne vogliamo selezionare solo una di queste può essere utile usare il comando **Lasso On/Off**  mediante lazo oppure la versione **Lasso On/Off**  mediante rettangolo.

11. Opzioni più avanzate per disegnare


Utilizzo dei Templates

ChemSketch fornisce Templati di varie strutture complesse permettendone la loro introduzione come frammenti nel nostro foglio di lavoro. Sono due gli insiemi di Templati presenti nel programma: la **Table of Radicals** e la **Template Window**.


Per aprire la prima tabella di Templati possiamo selezionare dal menù **Templates** il comando **Table of Radicals**, oppure premere il tasto **F6** sulla tastiera o l'icona  posizionata sulla barra degli strumenti a destra del foglio di lavoro. Una finestra contenente vari frammenti di molecole (essenzialmente) organiche si aprirà. A questo punto, dopo aver selezionato il frammento voluto la finestra dei Templati si chiuderà e si ritornerà automaticamente al foglio di lavoro. Si posiziona il puntatore sull'atomo al quale vogliamo attaccare il frammento e si clicca con il pulsante sinistro del mouse. Il puntatore manterrà la possibilità di aggiungere nuovamente il Template selezionato, per esempio su un altro atomo; ciò sarà possibile spostandosi su questo secondo atomo e cliccando nuovamente con il pulsante sinistro. Se, invece, non si vuole più utilizzare il template basterà cliccare sul pulsante destro del mouse.

In generale ci sono 3 modi per attaccare un template ad una struttura disegnata:

- 1) il frammento viene attaccato tramite un legame quando si punta su un atomo della struttura;
- 2) il frammento viene fuso alla struttura quando si punta su un legame della stessa;
- 3) il frammento forma una connessione spiro quando si punta su un atomo e si tiene premuto il tasto Maiuscolo mentre si clicca.

Altri Templati sono ottenibili dalla **Template Window**, raggiungibile anch'essa dal menù dei **Templates**, oppure cliccando sull'icona  o sul tasto **F5** della tastiera. Aperta la **Template Window** si può vedere che alcune classi di Templati sono elencate lungo il lato sinistro e che sfogliando il drop down menù in alto vicino al tasto **Draw** se ne possono trovare molti altri. Da notare che questa finestra dei template contiene non solo molecole (anche molto complesse) e ioni, ma anche disegni per kit di laboratorio e per orbitali.

Instant Template



Questo comando consente di creare dei template temporanei mentre si disegna. Se una struttura è fatta dalla ripetizione di un frammento si può disegnare il singolo frammento, quindi si seleziona il comando  e si clicca sull'atomo del frammento che sarà il punto di connessione. Un template temporaneo verrà creato che potrà essere attaccato ad una struttura già disegnata come visto sopra per i frammenti della **Table of Radicals**.

n.b. Mentre nel caso dei frammenti contenuti nella **Table of Radicals** il punto di attacco è già definito nel caso dei template contenuti nella **Template Window** e degli **Instant Template** il punto di attacco del frammento può essere diverso.

12. Stereochimica: legami Wedge

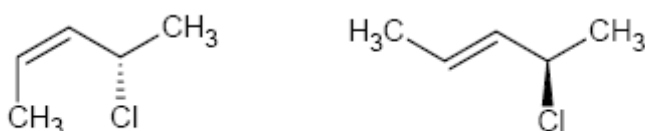
Per disegnare uno specifico stereoisomero sono presenti i *Wedge bonds*, che consentono di definire la configurazione di uno stereocentro.

Solitamente è conveniente disegnare la molecola utilizzando la rappresentazione standard ed introdurre poi i legami *Wedge*. La procedura utilizzata per cambiare un semplice legame con un legame *Wedge* consiste, dopo aver disegnato la molecola, nel selezionare il legame *Wedge* desiderato e poi cliccare sul legame che vogliamo modificare.

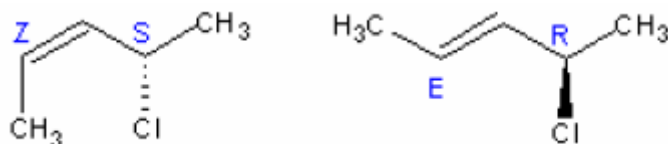
I legami *Wedge* sono: il legame *Wedge* solido, rappresentato dall'icona  ed utilizzato per gli atomi al disopra del piano definito dallo schermo, ed il legame *Dashed Wedge* , utilizzato per gli atomi al disotto del piano di disegno.

Con ChemSketch si possono generare i descrittori di configurazione per stereocentri tetraedrici (S e R) e di doppi legami (E e Z).


- 1) Disegnare le seguenti molecole con i metodi descritti fin qui:





- 2) Selezionare le due strutture
- 3) Dal menù **Tools** puntare su **Generate** e scegliere **Stereo Descriptors**. Sulle molecole appariranno i diversi descrittori.

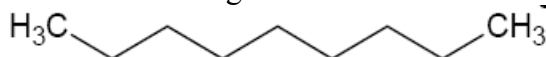


13. Ottimizzazione 2D della struttura

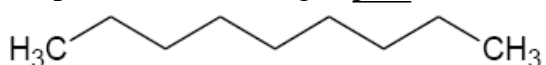
La ottimizzazione 2D viene effettuata mediante l'uso del comando **Clean Structure** . La procedura consente di modificare in maniera automatica distanze ed angoli di legame secondo criteri acquisiti.


Esempio: costruire un alcano ciclico (ciclononano)

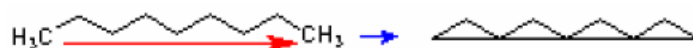
- 1) Selezionare C  dal **Atoms Toolbar** (lato a sinistra dello schermo)
- 2) Cliccare su **Draw Chains**  e disegnare una catena alifatica a 9 membri.



- 3) Usare il pulsante **Flip Top To Bottom**  per girare in basso la molecola



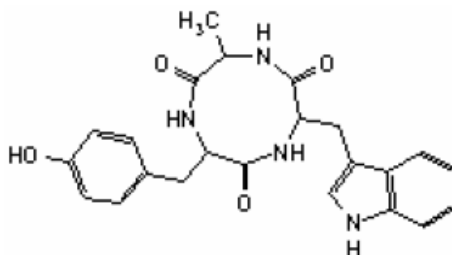
- 4) Selezionare **Draw Normal**  e connettere le due estremità della catena cliccando su un gruppo CH₃ terminale e tenendo premuto sul mouse unire l'altra estremità della molecola.




5) Cliccare su **Clean Structure**  per ottenere la struttura seguente



Esempio: Disegniamo il peptide ciclico Tyr-Ala-Trp



1) Assicurarsi di essere nel modo **Structure**

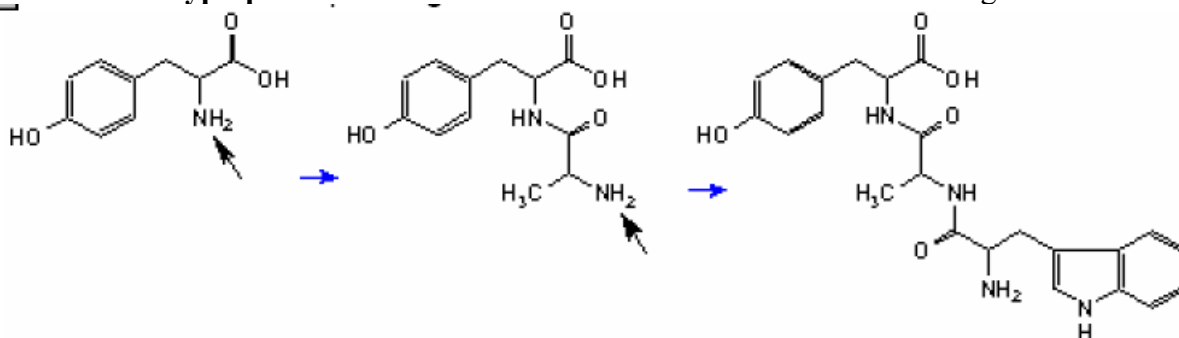
2) Aprire la finestra dei template dal menù **Template** → **Template window** ,


selezionare **Amino Acids** (oppure dalla **Table of Radicals**)

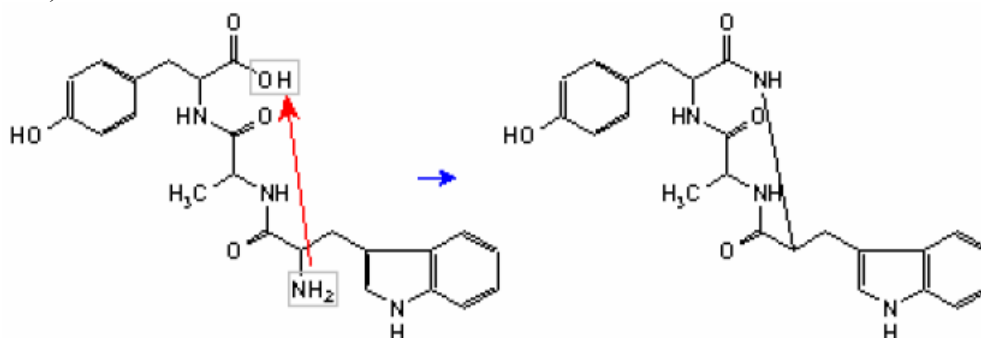
3) Cliccare su Tyrosine e quindi ricliccare sul foglio di lavoro per copiarla.

4) Sempre dalla **Template window**  o dalla **Table of Radicals** selezionare **Alanine**

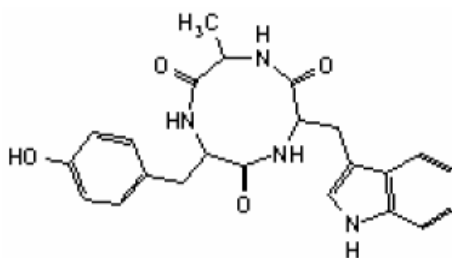
Ala- e **Tryptophane** **Trp-** e attaccarli l'un l'altro come indicato di seguito:



5) Passare nel modo **Select/Move**  e trascinare il gruppo NH_2 sul gruppo OH come nella figura seguente (o collegare con **Draw Normal** il gruppo amminico al C-radical del carbossile):



6) Cliccare su **Clean Structure**  per ottenere la seguente struttura:






14. Ottimizzazione 3D della struttura

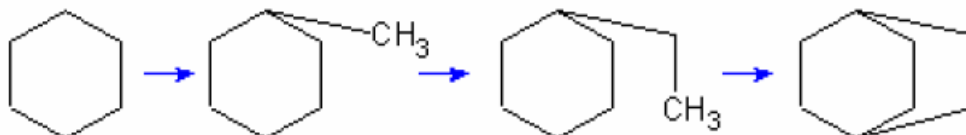
La ottimizzazione 3D viene effettuata mediante l'uso del comando **3D Optimization**





Esempio: Costruire la molecola del Biciclo[2.2.2]ottano




- 1) Dal menù **Options** scegliere **Preferences**, nella finestra di dialogo andare sotto **Structure**
- 2) Nell'area **3D Optimization** deselezionare la casella **Add Hydrogens** e cliccare **OK**.
- 3) Selezionare la **Table of Radicals** , e scegliere **Cyclohexane** . Cliccare sul foglio di lavoro per copiare la molecola di cicloesano.
- 4) Cliccare su **Draw Normal**  e disegnare i ponti idrocarburici come mostrato nello schema:



- 5) Cliccare su **3D Optimization**  per ottenere il modello 3D della struttura.
- 6) La molecola può essere ruotata nel modo 3D mediante **3D Rotation mode**  puntando con il mouse su un atomo o su un legame della molecola e muovendosi sul foglio di lavoro orientarla nel modo seguente:



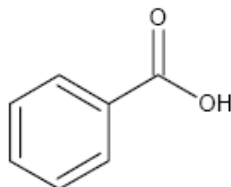
n.b. Dal menù **Options** scegliere **Preferences** e cliccare su **Structure**. Si può scegliere se il legame che si trova dietro debba essere interrotto o no evidenziando o meno la casella **Enable** nell'area **Bonds Intersections**. Si può cambiare la posizione dei legami che si incrociano applicando i comandi **Bring Bond to Front** (CTRL+F) o **Send Bond to Back** (CTRL+K) dal menù **Tools** dopo

aver selezionato il legame. Si può fare questo anche cliccando sul comando **Change Position**  tenendo premuto il tasto SHIFT sulla tastiera.

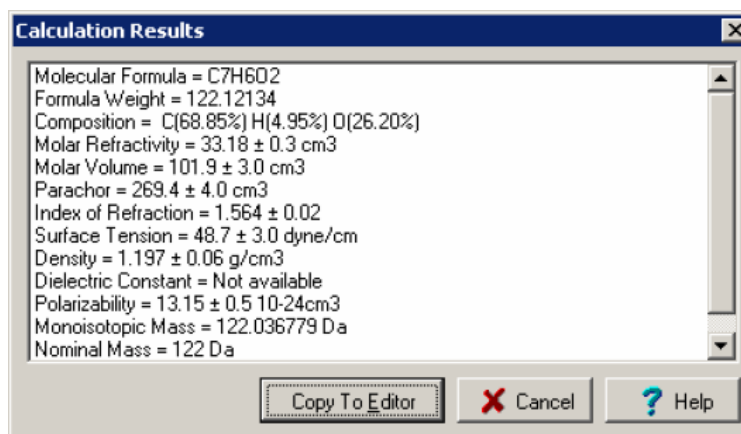
15. Calcolo delle proprietà di una molecola

In ChemSketch è possibile calcolare alcune o tutte le proprietà disponibili per le molecole disegnate.

- 1) Come prima cosa bisognerà disegnare la molecola, ad esempio dell'acido benzoico:



- 2) Dal menù **Tools** puntare su **Calculate** e poi scegliere tutte o alcune delle proprietà disponibili.
- 3) A questo punto le proprietà calcolate appariranno nella finestra **Calculation Results**. Ad esempio se si è scelto di calcolare tutte le proprietà per l'acido benzoico la finestra apparirà così:



- 4) Le proprietà calcolate possono essere copiate nel foglio di lavoro cliccando su **Copy to Editor**. Quando il testo viene inserito si passa automaticamente nel modo **Draw** che consente di modificare il testo. Per disegnare bisognerà passare nella modalità **Structure**.

Il programma permette anche di calcolare il logaritmo della costante di ripartizione ottanolo/acqua (logP) della molecola disegnata. LogP è un importante parametro molecolare che rappresenta il logaritmo del rapporto tra le concentrazioni di un composto all'interno delle due fasi immiscibili all'equilibrio (costante di ripartizione ottanolo/acqua). L'importanza di questo parametro consiste nell'indicazione del livello di idrofilia o lipofilia di una sostanza chimica.


$$\log P = \log \frac{[\text{drug}]_{\text{octanol}}}{[\text{drug}]_{\text{water}}}$$

Il pulsante  si trova nella barra degli strumenti in alto a destra.

16. Funzioni speciali

Assegnazione del nome IUPAC alla molecola

Per assegnare il nome IUPAC ad una molecola una volta che è stata disegnata è possibile utilizzare il pulsante **"Generate name for structure"**. Per accedere a questa opzione selezionare dal menù

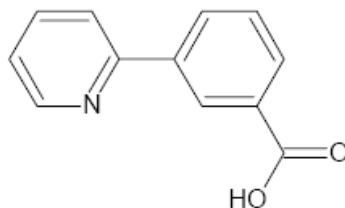
Tools il pulsante **Generate** e da qui **Name for structure**. La stessa opzione può essere impostata selezionando il tasto  che si trova in alto a destra della barra degli strumenti.

Nella versione gratuita questa opzione può avere alcune limitazioni sul numero e tipo di atomi e di cicli contenuti nella molecola.


Inoltre, non è possibile cambiare le regole con cui il nome viene assegnato. Le regole utilizzate sono quelle che portano al nome IUPAC preferibile.

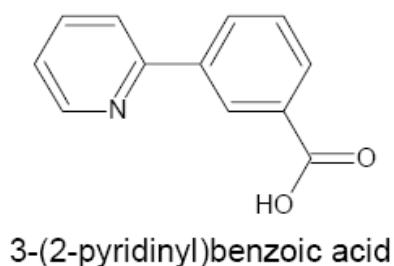
Esempio:

1) Usando ChemSketch disegnare la seguente molecola





2) Se il foglio di lavoro contiene più di una molecola selezionare la molecola data

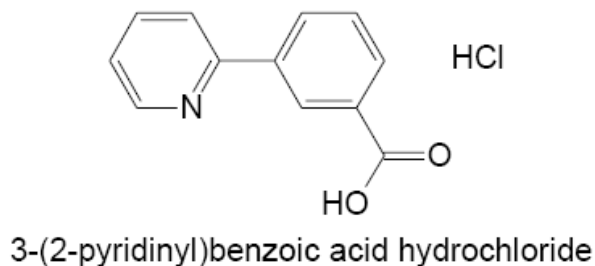
3) Cliccare sull'icona del comando **Generate name for structure**  o, dal menù **Tools** selezionare **Generate** e quindi **Name for Structure**. Il nome della molecola apparirà nella parte sottostante:



1) Spostare la stringa del nome per trascinamento con il mouse

2) Selezionare l'atomo di Cloro  e cliccare vicino alla precedente molecola in modo che appaia HCl


3) Selezionare entrambe le strutture e cliccare nuovamente su **Generate name for structure** . Questa volta il nome apparirà in questo modo:



17. Importare ed esportare strutture

ChemSketch può aprire, importare, salvare o esportare files usando vari formati. Molti di questi formati sono utilizzati da altri programmi che richiedono l'utilizzo di strutture chimiche. Dal menù **File** i tipi di files che si possono scegliere sono disponibili dalla solita finestra di dialogo che appare per la scelta del nome del file e del tipo.

18. Disegnare Strutture di Lewis



E' possibile disegnare strutture di Lewis grazie all'utilizzo dei Templati. Dal menu **Templates** scegliere **Template Window** (oppure selezionare l'icona ). Selezionare, quindi, dal drop down menu dei Templati (vicino al tasto **Draw**) l'opzione **Lewis structures** o **Reaction symbols**. Il Template **Lewis structures** offre varie strutture pre-disegnate ed un vasto assortimento di dots (punti). Il Template **Reaction symbols** offre un numero più limitato di simboli.

D. Uso del programma 3D Viewer


Il programma ACD/3D Viewer ottimizza strutture contenenti atomi con valenze standard. Il programma non prende in considerazione legami ad idrogeno. Il massimo numero di atomi permessi nella struttura da ottimizzare è 250 contando anche gli atomi di idrogeno. 3D Viewer sa calcolare il modello tridimensionale delle molecole con una buona approssimazione, ma per calcolare il vero modello tridimensionale di una molecola servono programmi più sofisticati che utilizzano calcoli lunghi e complessi.

1. Trasformazione della struttura da 2D a 3D

Dopo aver disegnato sul foglio di ChemSketch la nostra struttura (che è una struttura 2D), possiamo convertirla in una struttura 3D con l'ausilio di 3D Viewer.


1) Per far questo possiamo selezionare dal menù **Tools** l'opzione **3D Structure Optimization**, oppure il tasto  presente nella barra degli strumenti in alto. La molecola si trasformerà assumendo una forma tridimensionale; per verificarlo basterà ruotarla selezionando il pulsante  e muovendo la stessa con il puntatore.

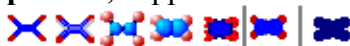
2) Per trasferire la nostra molecola nello spazio 3D possiamo selezionare la molecola sul foglio di ChemSketch e premere poi il pulsante rettangolare chiamato **Copy to 3D** (nell'angolo in basso a sinistra dello schermo). ChemSketch passerà quindi al modulo 3D. Se non vediamo il pulsante **Copy to 3D** significa che il programma 3D Viewer non è aperto e che bisognerà, quindi, farlo partire.

A partire dalla versione 8 è possibile aprire 3D Viewer cliccando sull'icona , presente in ChemSketch nella barra degli strumenti in alto, oppure dal menu **ACD/Lab** → **3D Viewer**.

n.b. E' possibile aprire i programmi ChemSketch e 3D Viewer in qualsiasi ordine, ma se sappiamo che andremo ad utilizzare entrambi i programmi conviene aprire prima 3D Viewer, il quale aprirà automaticamente ChemSketch (mentre non è vero il contrario).


2. Manipolazione della molecola in 3D, misura di legami, angoli di legame, etc...

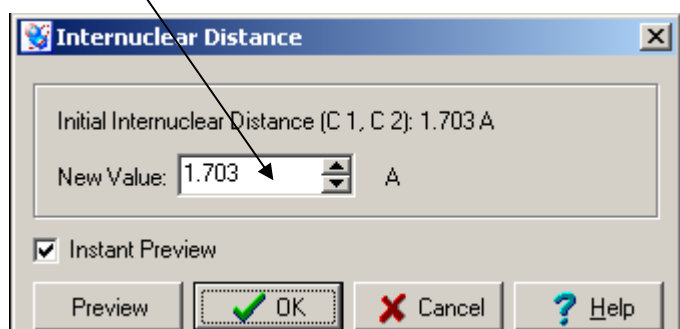
Prima di manipolare una struttura in 3D questa deve essere stata precedentemente ottimizzata in ChemSketch. Se questo non è avvenuto è possibile procedere all'ottimizzazione della struttura 3D all'interno di 3D Viewer dal menù **Tools 3D** → **Structure Optimization** o selezionando direttamente l'icona .





Per cambiare la rappresentazione della molecola è possibile selezionare dal menu **View** l'opzione desiderata → **Sticks, Balls & Sticks, Dots Only, Disks, o Spacefill**, oppure selezionare direttamente il pulsante di comando corrispondente a questa opzione: 

Inoltre premendo il pulsante destro del mouse si aprirà sullo schermo una finestra da cui potremo selezionare **Change View Style**, che ci consentirà di passare da una rappresentazione della molecola all'altra.

Per misurare lunghezze ed angoli di legame dobbiamo selezionare dal menù **Tools** l'opzione **Change Geometric Parameter** e quindi selezionare con il puntatore gli atomi coinvolti nella misura, oppure selezionare direttamente l'icona corrispondente alla funzione desiderata (vedi di seguito).



Per misurare e modificare la **lunghezza di un legame** dobbiamo selezionare l'icona **Bond Length**  e successivamente gli atomi coinvolti nel legame che ci interessa. Una volta selezionati gli atomi si coloreranno di verde ed una finestra che riporta il valore del legame in Å si aprirà. Se vogliamo sarà possibile cambiare il valore del legame inserendo manualmente il valore nel riquadro mostrato di seguito.

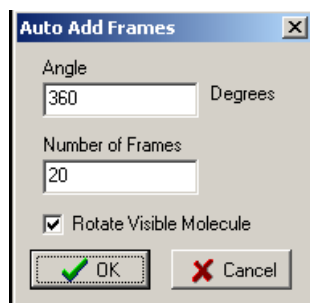


Per misurare un **angolo di legame** dovremo selezionare l'icona **Angle**  e procedere come sopra. Per misurare un **angolo di torsione** dovremo selezionare **Torsion Angle**  e successivamente gli atomi coinvolti. Se vogliamo creare la **molecola speculare** dobbiamo selezionare l'icona **Mirror**  e poi la nostra molecola, mentre se vogliamo **invertire** un particolare **centro asimmetrico** dobbiamo selezionare l'icona **Invert Center**  e successivamente il centro asimmetrico di cui vogliamo invertire la configurazione (R/S).



n.b Per un problema del programma quando invertiamo la configurazione R/S la struttura si altererà si dovrà quindi ottimizzare nuovamente la molecola .

Per muovere la molecola nello spazio possiamo utilizzare i pulsanti: , le cui funzioni possono essere richiamate anche dal menù **Tools (Rotate Mode, Drag Mode, Z-Rotate Mode, Fixed Angle Rotation Mode)**. I pulsanti  invece ruotano automaticamente la molecola. Il programma consente di registrare un movimento molecolare e creare un'animazione che può essere salvata come immagine **gif animata** (questa è una nuova opzione della versione 10 del programma).

Per salvare una animazione si può procedere nel modo seguente: dopo aver disegnato la molecola in ChemSketch e averla visualizzata in 3D Viewer si seleziona il tasto **New Frame Set**  (per eliminare eventuali frame già esistenti), si seleziona il tasto **Auto Add Frame**  e automaticamente si apre la finestra di dialogo.



Le informazioni contenute nella finestra indicano che la molecola verrà ruotata automaticamente di 360° e che il movimento verrà scomposto in 20 frames. Il numero di frames può essere modificato e per rendere il movimento più lento bisognerà aumentarlo. Premere **OK**, sullo schermo sarà possibile vedere l'intero movimento; alla fine dal menù **File** salvare come file .gif animato.

Utile è inoltre l'icona **Select Atoms**  che consente di selezionare un particolare atomo. Se desideriamo far corrispondere all'atomo selezionato un diverso colore lo possiamo fare selezionando il pulsante **Set Colors** .

Infine, se vogliamo tornare a ChemSketch possiamo cliccare sul tasto **ChemSketch** in basso a sinistra che ci riporterà direttamente al foglio di lavoro di partenza. Ogni volta che facciamo cambiamenti sulla molecola dovremo selezionare il tasto **Copy in 3D** per aggiornare la visualizzazione della molecola in 3D Viewer.