### Potrzebujesz narysować wzór chemiczny, strukturę cząsteczki organicznej i nieorganicznej, schemat reakcji lub nawet bardzo skomplikowany mechanizm reakcji?

## Nieoficjalna podstawowy kurs obsługi programu ISISDraw

czyli jak stworzyć rysunek wzoru chemicznego, struktury cząsteczki, schemtau reakcji, następnie jak zapisać w róznych formatach, wydrukować, przenieść taki rysunek do dokumentu do MS Worda. To nie koniec, będziesz mógł również zobaczyć narysowaną strukturę w trzech wymiarach, otrzymasz dokładne wartości masy cząsteczkowej, składu procentowego, a nawet nazwę cząsteczki zgodną z zaleceniami IUPAC!

Autor: Nikodem Kuźnik

#### Parę słów od autora

Jestem autorem kilku innych ciekawych <u>stron poświęconych chemii</u> - między innymi orpogramowaniu chemicznemu. Otrzymuję dość dużo pytań czy jest dostępna dokumentacja do programów chemicznych w języku polskim, a przede wszystkim do programów umożliwiających rysowanie wzorów i reakcji chemicznych. Niestety nie jest mi znana dokumentacja tego typu. Zdecydowałem więc, że postaram się pomóc polskim użytkownikom pisząc którtki, podstawowy, nieoficjalny kurs obsługi programu ISISDraw, który, moim zdaniem, jest najwygodniejszym narzędziem do rysowania struktur oraz reakcji chemicznych dostępnym za darmo dla studentów oraz instytucji akademickich. (w chwili tworzenia tej strony, tj. 28.07.2001).

#### Małe kredo autora

Poco w ogóle ja to robię? Po co poświęcam swój czas na przygotowanie takiej strony? Moja odpowiedź: Bo sprawia mi to statysfakcję i widzę w tym dużo głebszy sens. Moge przedstawić moje spojrzenie w kilku zdaniach:

Nie wiadomo skąd przyszliśmy i nie wiadomo dokąd pojdziemy, ale została nam dana na krótka chwila, życie, które mamy tutaj wszyscy spedzić wspólnie na jednej małej Ziemii (nie tak szybko skolonizujemy Czerwoną Planetę...). Możemy tę krótką wspólna chwilę spędzić w różny sposób: siedząc w swoich czterech ścianach, nie odzywając się do siebie, walacząc ze sobą i wydrapując sobie nazwajem oczy... Ale poco? Czy zdobycie majątku kosztem cierpienia innych, jego ziemii czy władzy jest tego wart i przynosi szczęscie i trwa wiecznie? Czy któś taki może spokojnie odejść stąd, zasnąć czy też będzie przez całe życie bał się tego momentu - śmierci? Mój pogląd, to twierdzenie, iż nie możemy zrobić nic lepszego jak pomagać sobie wzajemnie. Możemy zmieniać świat poprzez wielkie rzeczy, ale dużo SKUTECZNIEJ możemy działać czyniąc małe, drobne rzaczy jeden dla drugiego Są tysiące spraw, jest wiele tysiecy rzeczy, które możemy zrobić pomagając sobie, aby ta którtka chwila tutaj była dla nasz wszystkich przyjemniejsza i abyśmy potem mogli spokojnie zamknąć oczy...

Jeśli się ze mną zgadzasz, odwiedź moją mała strone tysiące rzeczy, bo Ty też możesz zrobić wiele!.

#### 1. Skąd pobrać program ISISDraw?

Program ISISDraw można pobrać ze stron <u>MDL Information Systems, Inc.</u> w USA. Po wejściu na stronę firmy należy przejść do stron... Można automatycznie być tam przekierowany po

kliknieciu na <u>ten odnośnik</u>. Ze względu na prawa autorskie i licencją, nie można umieścić kopii programu na polskim serwerze, co na pewno przsieszylo by jego pobieranie dla dużej częsci polskich użytkowników. Zanim jednak będzie można pobrać plik ze stron firmy, należy najpierw <u>zarejestrować się</u>. Program jest dostepny ze darmo dla studentów oraz pracowników instytucji akademickich. Komercyjni użytkownicy (pracownicy placówek przemysłowych, rządowych oraz pozostali użytkownicy powinni skontaktować się z <u>działem sprzedarzy MDL Information</u> <u>Systems, Inc.</u>. Na stronie umożliwiajacej probranie programu jest dostępnych kilka plików: najnowsza wersja dla systemu MS Windows, starsza wersja tez dla tego systemu, wersja dla systemu MacOS (co raczej nie interesuje potencjalnego polskiego użytkownika przyzwoitego komputera klasy PC), oraz wersje azjatyckie oznaczone znakiami ... Dostępne są również pliki pomoc oraz dodatki. Te ostatnie mogą być bardzo pomocne, ale wiecej na ten temat znajdzie sie w specjalnej częsci poświeconej dodatkom do ISISDraw.

#### 2. Jak zainstalować program ISISDraw?

#### 3. Pierwsze uruchomienie programu ISISDraw.

W wyniku prawidłowego zainstalowania programu została utworzona grupa "ISISDraw x.y", w której znajduje się miedzy innymi ikonka "ISISDraw x.y" pozwalająca na bezpośrednie uruchomienie programu. "x.y", to wersja i podwersja zainstalowanego programu (w chwili pisania tej strony -27.07.2001 aktualna wersja programu to 2.3). Uruchomiony program otwiera okno - *Rysunek 1*..



Rysunek 1. Widok okna głównego po uruchomieniu programu.

Okno programu składa się z białej, początkowo czystej powierzchni, na której stworzymy rysunek, z poziomego, na który składaja się podmenu: File, Edit, Options, Objects, Text, Templates, Chemistry, Windows, Help. Ponieżej znajduje się również poziomy pasek z ikonami

często używanych szkleletów wzorów cząsteczek - Rysunek 2.

*Rysunek 2.* Poziomy pasek często używanych szkleletów wzorów cząsteczek. Natomiast z lewej strony wzdłuż całego okna programu znajduje się pionowy pasek narzędzi i elementów struktury i reakcji. Część ikon narzędzi tego paska można rozwinąć do podmenu, które pokazuje więcej narzędzi podobnego typu do wyboru. Ikony narzędzi, które można rozwinąć do podmenu mają mały czarny trójkąt w jej prawym dolnym rogu danej ikony. Rozwinięcie podmenu można uzyskać poprzez dłuższe przytrzymanie prawego klawiasz myszki w momencie gdy wskaźnik kursora znajduje się nad ikoną, którą chemy rozwinąć do podmenu. Wybór nadzędzia podmenu odbywa się przez dalsze przytrzymanie prawego klawisza myszki i przesuniecie wskaźnika kursora nad narzędzie podmenu, które chcemy wybrać - *Rysunek 3.* Dodatkowo pod po rozwinietym podmenu pokazuje się opis narzędzia w jezyku angielskim.





# 4. Moja pierwsza cząsteczka stworzona przy pomocy programu ISISDraw! Podstawy rysowania wzorów strukturalnych.

Zanim stworzymy nasz pierwszy wzór cząsteczki chemicznej, musimy zdać sobie sprawę, iż program ISISDraw został napisany do tworzenia wzorów i reakcji chemicznych dla chemików, którzy posługują się pewnymi uproszczeniami: pierwsze uproszczenie które napotkamy przy rysowaniu jakiegokolwiek wzoru chemicznego cząsteczki organicznej, to brak oznaczenia literowego dla atomów węgla i wodoru, chyba że są one "wyjątkowe". Co to oznacza? atomy węgla bedą znajdować się na końcach "kresek" symbolizujących wiązania między nimi, chociaż atomy te nie bedą oznaczone literą "C", natomiast atomy wodoru nie bedą w ogóle oznaczone ani nie beda reprezentowane przez żaden objekt, ponieważ zakładamy, iż atom wegla jest czterowiazalny, czyli dysponuje czterema "kreskami" symbolizujacymi wiazania chemiczne. Jesli zatem we wzorze strukturalnym atom wegla będize połaczony taką "kreska" tylko z jednym innym atomem węgla, to domyślamy się iż jego trzy pozostałe nie wykorzystane "kreski" wiązania zostały "zużyte" na połączenie z wodorami, czyli ten przykład, to grupa -CH<sub>3</sub>. Dla części użytkowników może to być oczywiste, jednak początkujący chemicy lub osoby nie związane bezpośrednio z chemią mogą dziwić się, iż "-" to uproszczony wzór strukturalny etanu, a "=" symbolizuje eten (etylen). Dla pocieszenia tej drugiej grupy użytkowników mogę dodać, iż stworzenie pełnego wzoru strukturalnego z oznaczonymi literowo atomami węgla i wodoru jest również możliwe, chociaż może wymagać trochę wiecej pracy. Postaram się jednak zademonstrować takie struktury w kolejnych przykładach.

Czy w końcu możemy narysować jakąś strukturę? Ależ oczywiście! Na dobry początek narysujmy propan, czyli nasycony węglowogór alifatyczny o wzrorze sumerycznym: C<sub>3</sub>H<sub>8</sub>. **3.1.** Przytrzymaj lewy klawisz myszy ze wskaźnikiem nad narzędziem do wyboru rodzaju wiązań na pinowym pasku narzędzi po lewej stronie. Rozwinie się podmenu. Dalej trzymając

klawisz myszy puść go nad ikona obrazującą wiązanie pojedyncze, tak jak na Rysunku 4.

`Ą´			
<sub>°</sub>	<u>~ // //</u>		
4	Single Bond Tool		
~~,	Click: Press-drag:	Sprout a single bond Draw a single bond	
+	Click a bond:	Change to a single bond	
C,	Repeat click:	Switch between single, double, and triple bond	
.1. ,			
***			

*Rysunek 4*. Sposób wyboru narzędzia do rysowania wiązania pojedynczego. **3.2.** Aby upewnić się, iż zostało wybrane narzędzie do rysowania wiązania pojedynczego ikona tego narzędzia powinna być zaciemniona, powinna obrazować pojedynczą "kreskę", a umieszczenie wskaźnika kursora nad ikona tego narzędzia bez klikania nań powinna pokazać etykietę "Single Bond", tak jak na *Rysunku 5*.



*Rysunek 5.* Prawidłowo wybrane narzędzie do rysowania wiązania pojedynczego. Dodatkowo jeśli przesuniesz wskaźnik kursora na białą powierzchnię rysowania, będzie on teraz wyglądał jak odwrócwona i pochylona litera Y ze strzałką skierowaną od lewego górnego rogu. Ogólną regułą w programie ISISDraw jest, iż na pionowym pasku narzędzi ikony narzędzi, które można rozwijać do podmenu przyjmują taką funkcje, jaka zostałą wcześniej wybrana w podmenu lub jaka została ustawiona domyślnie podczas startu programu, jeśli potem nie została zmieniona. W następnych przykładach etapy 1. i 2. będziemy opisywać w skrócie - wybierz narzędzie ... z podmenu.

**3.3.** Przesuń wskaźnik kursora na biały obszar rysowania i i naciśniej raz lewym klawiszem myszki. Pojawi się nachylona do poziomu kreska - to uproszczony wzór strukturalny etanu! (Jesli masz wątpliwości przeczytaj wstęp do tej sekcji.)

**3.4.** Przesuń wskaźnik kursora nad środek wiązania, które narysowałeś - zostanie ono ozaczone prostokątem na całej dlugości. naciśnij lewy klawisz myszy - z pojedynczego wiązania zrobi się podwójne. Naciśniej w tym samym miejscu jeszcze raz - otrzymasz wiązanie potrójne. Kolejne naciśniecie lewego kalwisza myszy w tym samym miejscu spowoduje powrót do wiązania pojedynczego (*Rysunek 6*). Już potrafisz rysować wiązania pojedyncze i wielokrotne (czyli o różnej rzędowości)!

~~<sup>\_\_\_\_</sup>\_\_

*Rysunek 6.* Pierwszy etap tworzenia propanu - dwa atomy węgla (nieoznaczone) połaczone wiązaniem pojedynczym - etan.

Wskaźnik kursora nad jednym z końców wiązania umiżliwi dobudowę kolejnego wiązania i atomu węgla.

**3.5.** Teraz przenieś wskaźnik kursora nad jedno z końców wiązania - pojawi się kwadracik oznaczajacy iż dalsza dobudowa rozpocznie się od tego miejsca (*Rysunek 6.*) i naciśnij. Otrzymasz uproszczony wzór strukturalny propanu (wyglądajacy jak odcinek złamany w połowie) - *Rysunek 7*.

*Rysunek 7*. Moja pierwsza cząsteczka - uproszczony wzór strukturalny propanu. Nie tak sobie wyobrażaleś propan? Możemy teraz dodać opisy literowe atomów w trzech miejscach tego "złamanego odcinka"

**3.6.** Z pionowego paska narzędzi wybierz narzędzie do przypisaywania/oznaczania atomów (o etykiecie "Atom")- *Rysunek 8*.



Rysunek 8. Narzędzie do przypisywania i oznaczania atomów.

Na końcach i w połowie cząsteczki pojawią się małe kwadraty jeśli będziesz przesuwał nad nimi wskaźnik kursora, który zmienił się na skutek wyboru innego narzędzia (teraz odwórcona i pochylona litera Y ma małe kólko na skrzyżowaniu ramion). Naciśnij lewy klawisz myszy w miejscach gdzie pojawiają się te kwadraty, pojawi się pole tekstowe do opisania atomów. Wpisz odpowiednio na końcach CH3, natomiast na środku CH2. Indeks dolny dla tych cyfr będzie automatycznie dopisany. Operacja to pokazana jest na *Rysunku 9*.



Rysunek 9. Wprowadzanie opisu dla poszczególnych atomów.

Nie masz już chyba wątpliwości, że otrzymana w ten sposób struktura przedstawia propan. Możesz jednak stworzyć pełny wzór strukturalny propanu, jeśli ta struktura ciagle Cię nie satysfakcjonuje.

**3.7.** Wybierz ponownie narzędzie do rysowania wiązania pojedynczego (tj. w punkcie **1.**). Wskaźnik kursora umieść na literze C opisanego w poprzednim punkcie atomów węgla. W przypadku skrajnych atomów węgla naciśnij 3 razy lewy klawisz myszy dodając 3 nowe wiązania dla wodorów, w przypadku środkowego atomu - 2 razy. Zauważ, że pokażdym naciśnięciu pojawi się nowe wiązanie dolączone do atomu, nad którym aktualnie znajduje się wskaźnik kursora, a jednocześnie oznaczona liczba atomów wodoru zmniejsza się o jeden. To jedna z "inteligentynch" funkcji programu ISISDraw - przypisuje danemu atomiw węgla tyle atomów wodoru ile pozostało niewykorzystanych wiązań max. 4 (to dla metanu oczywiście). Czynności opisane w tym podpunkcie są przedstawione na *Rysunku 10*.



*Rysunek 10.* Dodawanie nowych wiązań dla "przyszłych" atomów wodoru. Zastanawiasz się dlaczego cząsteczka wygląda tak dziwnie i część wiązań została utworzona pod niewłaściwymi kątami?

Musisz pamietać, że cząsteczka propanu jest bryłą przestrzenną, trójwymiarową, natomiast w tej chwili rysujemy cząsteczkę w dwóch wymiarach. Jest parę możliwości rozwiązania tego problemu, ale tym zajmiemy się w dalszej częsci kursu.

W wyniku tych operacji otrzymałem strukturę widoczną na Rysunku 11.



*Rysunek 11.* Propan z nowo dodanymi wiązaniami dla "przyszłych wodorów. **3.8.**W ten sam sposób jak opisano w **6.** opisz końce nowo dodanych wiązań jako atomy wodoru ('H"). Tę czynność demonstruje *Rysunek 12.* 



*Rysunek 12.* Dodawanie nowych wiązań dla "przyszłych" atomów wodoru. Te operacje doprowadziły do otrzymania pełnego wzoru strukturalnego propanu - *Rysunek 13.* 





Narysowana przez Ciebie struktura może mieć troche inne kąty wiązań dla atomów wodoru. **3.9.** Jeśli nowo utworzone atomy wodoru pokrywaja się (tak jak to ma miejsce w strukturze na *Rysunku 13*) lub też chcialbyś zmienić kąty wiązań lub ich długości użyj narzędzia do zaznaczania "Lasso Select" albo "Select", które znajdziesz w podmenu rowiniętego jak na *Rysunku 14*.

n n n n n n n n n n n n n n n n n n n	
Lasso Tool	
Press-drag:	Select the objects inside a <b>lasso</b>
Click on an object:	Select the object
with Ctrl key:	Select entire molecule
Press-drag on an object:	Move an object
Press-drag on a selection handle:	Resize an object
Double-click an object:	Edit the object properties
	Image: Click on an object:         With Ctrl key:         Press-drag on an object:         Press-drag on a selection handle:         Double-click an object:

*Rysunek 14.* Rozwinięte podmenu narzędzi do zaznaczania - "Lasso Select" i "Select". Po wybraniu jednego z tych narzędzi (w tym momencie nie robi różnicy którego) umieszczenie nowego wskaźnika kursora nad danym atomem wodoru (nad każdym atomem) spowoduje wyświetlnienie małego kwadratu. Jeśli w momencie kiedy widoczny jest ten kwadrat naciśniesz lewy klawisz myszy i trzymając przesuniesz wskaźnik kursora, dany atom ulegnie przemieszczeniu w miejsce w którym puścisz klawisz. Poeksperymentuj trochę. Mnie się udało otrzymać nieco lepszą strukturę, którą pokazuje *Rysunek 15* 



#### Rysunek 15. Poprawiony pełny wzór strukturalny propnau.

**3.10.** Jeśli w którymś w powyższych punktów pomyliłeś, lub chciałbyś cos powtórzyć, skorzystaj z narzędzia do gumowania - "Eraser" poprzez wybranie ikony na pasku narzędzi - *Rysunek 16.* Wskaźnik kursora również ulegnie zmianie (co jest widoczne na rysunku)



#### Rysunek 16. Narzędzie do gumowanie - "Eraser".

Naciśniećie lewego klawisza myszy podczas gdy wskaźnik kursura narzędzia do gumowanie będzie znajdował się nad jakimś objektem spowoduje jego usunięcie.

#### 4. Kilka sztuczek - część I.

Zachęcam do eksperymentowania i wypróbowania różnych możliwości - to chyba najlepsza droga do nauki.

Poniżej zamieszczam kilka sztuczek, które mogą być użyteczne w dalszej częsci kursu. **4.1.** Jak umiejętnie korzystać z narzędzie do zaznaczania: "Lasso Select" i "Select"? Narzędzia te pozwalają na zaznaczanie obszaro w różnych trybach. "Lasso Select" pozwala zakreśliść obszar, który ma być zaznaczony o dowolnym kształcie. Np. chcialibyśmy zaznaczyć tylko atomy wodoru przyłączone do jednego ze skrajnych atomów węgla w cząsteczce propanu otrzymanej w punkcie 3.8. Po wybraniu "Lasso Select" możemy precyzyjnie obrysować te atomy wodoru, ale możemy zrobić to w ten sposób, żeby atom węgla, do którego te wodry są przyłączone nie zawierał się w zaznaczonej powierzchni *-Rysunek 17* 



*Rysunek 17.* Zaznaczenie powierzchni o dowolnym kształcie dzięki "Lasso Select". Następnie kiedy ponownie umieścisz wskaźnik kursora nad jednym z atomów wodoru, wskaźnik zmieniś w "rączkę", która umożliwi przesunięcie zaznaczonych atomów (części cząsteczki) Jeśli jednak chcielibyśmy zaznaczyć całą grupe CH<sub>3</sub> możemy posłużyć się narzędziem "Select", które służy do zaznaczania powierzchni o kształcie prostokąta. Dzięki temu będziemy mogli np. przesunąć całą grupę metylową (CH<sub>3</sub>) lub zmienić jej kolor czy przekształcić ją aby była wyrysowana pogrubionymi liniami (o czym dalej). **4.2.** Jeśli w obszarze rysowanie znajduje się więcej cząsteczek, a naszym celem byloby zaznaczenie tylko jednej z nich, bardzo pomocnym narzędziem jest "Molecule Select". Można go znaleźć w podmenu narzędzi do wybierania -*Rysunek 18*.

<b>?</b>	<u>R</u> <u>R</u>	
6	Molecule Select Tool	
$\bigcirc$	Press-drag:	Select the molecules/objects inside a frame
Ϋ́́Ά	Click on a molecule/object:	Select the molecule/object
4	Press-drag on a molecule/object: Press-drag on a selection handle: Double-click a molecule/object:	Move a molecule/object Resize a molecule/object Edit the molecule/object
~~		properties

Rysunek 18. Narzędzie "Molecule Select".

**4.3.** Jeśli natomiast chcesz zaznaczyć wszystkie objekty, które znajdują się na obszarze rysowania (np. w celu skopiowania ich i przeniesienia do MS Worda - o tym w dalszej części kursu), można to zrobić bardzo szyko poprzez wybranie opcji "Select All" w menu "Edit" w górnym poziomym pasku menu. Jeszcze prościej będzie jeśli naciśniesz klawisz "Control" oraz "A" (dalej będę używać standartowego skrótu CTRA+A).

4.4. Podobnie do możliwości zaznaczania części elementów cząsteczki, można dokonać gumowania części cząsteczki. Wybierając narzędzie do gumowania "Eraser" można posłużyć się nim analogicznie jak narzędziem "Select", co zostało opisane w punkcie 4.1. z tą różnicą, że w wyniku tej operacji obszar znajdujący się wewnątrz prostokąta ulegnie zgumowaniu.
4.5. Jeśli przez przypadek zgumowaleś coś co nie było Twoim zamiarem, możesz posłużyć się tą magiczną funkcja "Undo" znaną z wielu innych aplikacji. Przewraca ona stan objektów na takie, jakie były przed ostatnio wykonaną operacją. Znajduje się ona w menu "Edit" w górnym poziomym pasku menu. Możesz tego również dokonać poprzez kombinację klawiszy CTRL+Z.
4.6. Wreszcie bardzo sprytne rozwiązanie dla wszystkich, którzy bedą budować strukturę zawierającą łańcuch alkilowe. W programie istnieją dwa narzędzia, które ułatwiaja budowe łańcucha o dowolnej długości. Są to "Chain" i "Multi-bond". *Rysunek 19*. pokazuje gdzie je można znaleźć.



#### Rysunek 19. Narzędzia "Chain" i "Multi-bind".

Narzędzie "Chain" pozwala na zbudowanie typowego łańcucha dowolnej długości. Po wyborze tego narzędzia wskaźnik kursora przyjmuje formę taką sama jak dla narzędzia rysowania wiązań. Teraz jendak po naciśnięciu i przytrzymaniu lewego klawisza myszy w miare przesunwania wskaźnika po obszarze rysowania, będa pojawiały się kolejny wiązania, a obok wskaźnika będzie widoczna cyfra sygnalizująca aktulną ilość atomów węgla w łańcuchu. Atomy węgla są oczywiści nie oznaczone literą (patrz - początek punktu **3**). Jeśli zostało utworzonych za dużo atomów węgla, można zmniejszyć ich ilość przesuwając sie zpowrotem z wskaźnikiem kursora. Zmiana kierunku przesuwania wskaźnika kursora, spowoduje też wmianę orentacji utworzonego łańcucha.

Narzędzie "Multi-bond" działa w podobny sposób jednak nie jest ono ograniczone do struktur liniowych. Poprzez zmianę kierunku przeuswania wskaźnikiem kursora trzymajac jednocześnie lewy klawisz myszy można wyrysować struktury cykliczne i inne. Obrazuje to Rysunek 20.



Rysunek 20. Dzieki "Multi-bind" można tworzyć również struktury alicykliczne.

Ta strona została przygotowa przy pomocy <u>darmowego edytora HTML W3e 2000</u>, natomiast zrzuty ekranu wykonałem posługując się programem <u>20/20</u>.

Chciałbym zaprosić wszystkich do odwiedzenia mojej storny poświęconej programom chemicznym dla systemu operacyjnego Linux - <u>Linux4Chemistry</u>. Lista tych programów jest coraz większa. Niektóre z nich przetłumaczyłem również na język polski (doskonały Viewmol, GPeriodic, Kemistry, ChemSuite). Zapraszam do świata <u>Linux4Chemistry</u>.

Ostatnia modyfikacja 28 lipiec 2001. Copyright (c) Nikodem Kuźnik 2001.