


2D molekulový editor - MarvinSketch

1. Web programu MarvinSketch: <http://www.chemaxon.com/products/marvin/marvinsketch/>





2. Spuštění programu

Spouštíme z terminálu příkazem `/home/martinp/bin/MarvinSketch &`

3. Přidávání atomů a vazeb

V levé liště vyberte tlačítko pro přidávání vazeb  a klikněte na plochu kde se umístí 2 atomy C spojené vazbou, pak klikněte na jeden z nich a držte tlačítko myši a myš přesuňte na místo kde se má nacházet druhý atom a pusťte. Tímto způsobem nakreslete strukturu butanu. Jednu z vazeb změňte na dvojnou tím, že na ni kliknete (při dalším kliknutí se změní na trojnou). Další typy vazeb lze nastavit přes kontextové menu (pravé tlačítko myši na vazbě), položka *Type*. Pro přidání atomu jiného prvku vyberte prvek na pravé liště (vyberte O) a přidejte na strukturu (přidejte tak, aby vzniklo chirální centrum a typ vazeb pak změňte na *Up* a *Down*).

4. Práce s plochou

Obrázek struktury na ploše lze zvětšit/zmenšit pomocí tlačítek   v horní liště nebo můžeme použít `<Ctrl>+<kolečko myši>` (pozice kurzoru myši určuje centrum zvětšení). K dispozici jsou tlačítka *Undo/Redo*  .

5. Vložení strukturního fragmentu

V dolní části okna klikněte na strukturu benzenu a pak klikněte na libovolný uhlíkový atom struktury na ploše, nastavte pozici přidávaného benzenového jádra a myš pusťte. Další fragmenty struktur lze vybírat z *Menu: Edit / Template Library*. Přidejte na jiný atom strukturu pyridinu (v sekci *Heterocycle*).

6. Označování atomů

Režim označování lze zvolit pomocí tlačítka  v horní liště. Lze označovat:



- Atomy – klikněte na něj, pro označení více atomů podržte `<Shift>`
- Dva atomy spojené vazbou – klikněte na vazbu spojující atomy
- Obdélníkovou nebo nepravidelnou oblast – vyberte typ označování *Rectangle Selection* nebo *Lasso Selection*, klikněte myši a táhněte kolem atomů, které mají být označeny.
- Celou strukturu – dvojklikněte na libovolný atom nebo použijte typ označování *Structure Selection* a klikněte na libovolný atom struktury.

Zrušení označení atomů - klikněte na plochu v oblasti kde nejsou žádné atomy.

7. Editace polohy atomů a struktury

Pro změnu polohy atomu nebo skupiny atomů tyto označte a pak umístěte myš do středu označených atomů, dokud se neobjeví modré zubaté kolečko, stiskněte myš a nastavte novou polohu atomů. Pro přemístění struktury ji nejdříve označte, přemístěte myš do středu struktury až se objeví modrý čtvereček a myš přesuňte. Pro natočení struktury postupujte podobně ale myš umístěte kus od středu až se objeví zubaté kolečko a pak stiskněte myš a natočte strukturu.


8. Editace typu atomů a vazeb, mazání atomů

Typ prvku změňme tak, že atom označíme a v pravé liště klikneme na požadovaný symbol prvku. **Vymazání atomu** – označíme atomy a stiskneme klávesu *Delete* nebo stiskneme tlačítko  na horní liště. Alternativně lze použít tlačítko  v horní liště a pak klikat na atomy, které se mají vymazat nebo táhnutím myši vymazat více atomů. **Typ vazby** u více atomů změňme tak, že označíme atomy, které vazby spojují a klikneme na tlačítko pro výběr vazby v levé liště (označte atomy benzenového jádra a změňte typ vazeb na aromatické - typ *Aromatic*).

9. Přidání náboje na atom

Formální náboj na atom nasatvíme kliknutím na tlačátka $+$ resp. $-$ na levé liště a kliknutím na příslušný atom (vyzkoušejte na atomu N pyridinu).



10. Zvýraznění vazeb v popředí

Vazby nacházející se v popředí můžeme zvýraznit pomocí tlačítka  v levé liště a následným kliknutím na příslušné vazby.

11. Optimalizace rozložení atomů struktury

Vyberte *Menu: Structure / Clean 2D / Clean in 2D*, dojde k opravení struktury tak aby byly optimální úhly mezi atomy a celkové rozložení atomů. Strukturu lze též optimalizovat v 3D – přepneme se do 3D režimu pomocí tlačítka $2D$ na spodní liště a pak zvolíme *Menu: Structure / Clean 3D / Clean in 3D*. Rotaci v 3D režimu lze provést pomocí *Menu: View / Mouse mode / Rotate in 3D* a následně použitím levého tlačítka myši.

12. Vkládání textu a kreslení

Na plochu lze vložit text pomocí ikony  na levé liště. Různé obrazce lze kreslit tlačítka .

13. Generování obrázku

Soubor s obrázkem struktury lze generovat pomocí *Menu: File / Export to Image*. Podporovány jsou rastrové soubory (např. PNG) i vektorové (např. EPS).

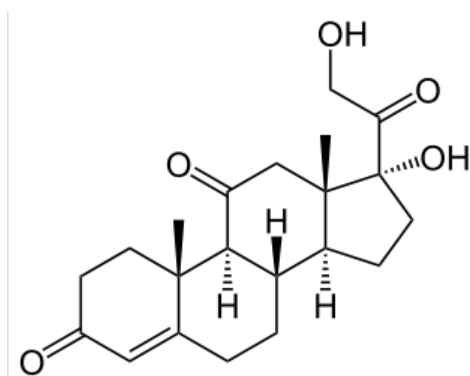
14. Uložení souboru

Soubor lze uložit pomocí *Menu: File / Save as* do souboru s koncovkou *.mrv*. Soubor lze opětovně načíst pomocí *Menu: File / Open*. Také lze ukládat soubory v jiných formátech, vybereme-li při ukládání ve *Files o Type* odlišný typ (např. SMILES).

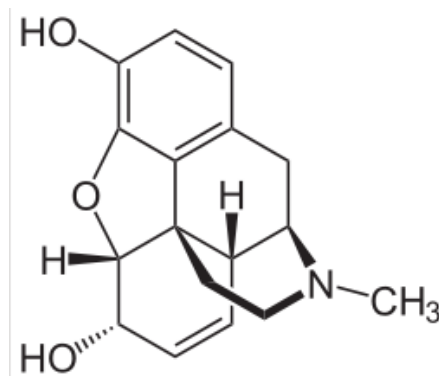
Úloha 1:

V programu MarvinSketch vytvořte 2D schéma struktury kortizonu a morfinu.

Do odevzdávrny vložte odpovídající soubory *.mrv a také soubor ve formátu SMILES a dále soubory s obrázky ve formátu PNG a EPS.



hydrokortizon



morfin

3D molekulový editor - Avogadro

1. Web programu MarvinSketch: <http://avogadro.cc>

2. Spuštění programu

Spouštíme z terminálu nahráním příslušného modulu: `module add avogadro` a pak spustíme: `avogadro &`.

3. Stavění molekuly

- Klikněte levým tlačítkem myši na ploše – dojde k přidání atomu uhlíku, automaticky se přidají atomy vodíku. Pro přidání dalšího navázaného atomu stiskněte levé tlačítko myši na existující atom uhlíku a táhněte myš na požadovanou pozici a uvolněte tlačítko. Tímto lze dále budovat molekulu.
- Pro změnu jednoduché vazby na dvojitou na vazbu klikněte, při dalším kliknutí se změní na trojnou a při dalším zpět na jednoduchou.
- Pro možnost přidávat atomy dalších prvků klikněte na tlačítko *Tool Settings* v horní liště. Ze seznamu lze vybírat nejběžnější prvky, ostatní jsou dostupné přes *Other* v seznamu (pak můžeme vybírat libovolný prvek z periodické tabulky - dvojkliknutím). Toto můžeme také využít pro změnu prvku existujícího atomu, kdy v seznamu vybereme prvek a pak klikneme na atom.
- Typ vazby, která se bude kreslit lze nastavit pomocí položku *Bond Order*. Položka *Adjust Hydrogens* umožňuje zapnout/vypnout automatické přidávání vodíků na strukturu.
- Vymazání atomu provedem kliknutím pravým tlačítkem myši na atom
- Program disponuje funkcemi Undo/Redo (v *Menu: Edit*).

4. Manipulace s molekulou


Klikněte na tlačítko Navigation Tool  v horní liště.

- Rotace – levé tlačítko myši
- Změna velikosti - kolečko myši nebo prostřední tlačítko myši.
- Posun ve vertikálním a horizontálním směru – pravé tlačítko myši

5. Grafická reprezentace molekuly

V horní liště stiskneme tlačítko *Display Settings*. V zobrazeném seznamu lze vybírat grafické reprezentace molekuly (Ball and Stick, Stick, Van der Waals Spheres, Wireframe ...).


6. Přidání fragmentu struktury

Na strukturu lze přidávat různé fragmenty pomocí *Menu: Built / Insert / Fragment*. V seznamu vybereme fragment (např. *pyridine* v sekci *heteroaromatics*) a vložíme na plochu. Propojení s původní strukturou provedem tak, že klikneme na tlačítko Draw Tool  v horní liště a myši spojíme požadované atomy.

7. Optimalizace geometrie


Optimalizaci struktury provede optimální nastavení délek vazeb, úhlu a torzních úhlů. Vyvoláme ji *Menu: Extensions / Optimize geometry*.

8. Označování atomů

Vybereme *Select tool* tlačítkem  v horní liště. Klikáním na jednotlivé atomy je označíme, držíme-li stisknuté <Shift> lze označit více atomů. Pro zrušení označení atomu držíme <Ctrl> a klikneme na atom. Více atomů můžeme označit tažením myši přes oblast atomů. Podobným způsobem lze označovat vazby.

V levé části okna jsou možnosti nastavení označování, v položce Selection Mode můžeme nastavit označování po atomech, residuích, molekulách.


9. Změna polohy atomů

Vyberte *Manipulation Tool* tlačítkem v  horní liště.

- Změna polohy atomu v rovině obrazovky – klikněte levým tlačítkem na atom a posuňte jej
- Změna polohy atomu v předozadním směru – klikněte prostředním tlačítkem na atom

a posuňte v požadovaném směru.

10. Otáčení kolem vazeb

Vyberte *Bond Centric Manipulation Tool* tlačítkem  v horní liště. Klikněte na vazby, zobrazí se čtverec v rovině vazby jehož úhel natočení lze změnit kliknutím na vazbu a tážením myši. Levým tlačítkem myši klikněte na jeden z atomů vazby a posunem změňte jeho úhel vůči druhému atomu v nastavené rovině.

Kliknutím na atom pravým tlačítkem myši lze změnit délku vazby.

Kliknutím levým tlačítkem na atom v sousedství atomu vazby lze měnit torzní úhel.

11. Vytváření souboru s obrázkem

Vybereme *Menu: File / Export / Graphics*. Dostupné jsou formáty PNG (doporučený), BMP, JPG.

12. Uložení souboru se strukturou

Soubor se strukturou lze uložit pomocí *Menu: File / Save as* a znovu načíst pomocí *Menu: File / Open*. Podporováno je několik formátů. Výchozí formát je CML.

Úloha 2:

V programu Avogadro vytvořte strukturu morfinu.

Do odevzdávací složky vložte odpovídající soubor ve formátu CML a obrázek ve formátu PNG.