

C2150

Zpracování informací a vizualizace v chemii a biochemii

2. lekce (Chemický vzorec I)

Petr Kulhánek

kulhanek@chemi.muni.cz

Národní centrum pro výzkum biomolekul, Přírodovědecká fakulta,
Masarykova univerzita, Kamenice 5, CZ-62500 Brno

➤ Chemický vzorec

klasifikace, využití, pravidla pro zápis

➤ Software

ACD/ChemSketch

(ChemDraw, Ketcher, Marvin, BIOVIA Draw (ISIS/Draw), XDrawChem, Kalzium, ...)

➤ Cvičení

ukázka jednotlivých programů, základní práce v ACD/ChemSketch projekty

Chemický vzorec

Chemický vzorec

Chemický vzorec je grafické zobrazení složení, případně struktury a prostorového uspořádání molekul chemické sloučeniny nebo prvku za použití symbolů prvků, případně čísel a dalších znaků (např. závorek) a grafických prvků (čar a křivek).

Typy chemických vzorců:

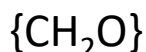
- Stechiometrický vzorec
- Sumární vzorec
- Funkční vzorec
- **Strukturní vzorec**
 - Konstituční vzorec
 - Rozvinutý konstituční vzorec
 - (Zjednodušený) Racionální konstituční vzorec
 - Elektronový vzorec (resonanční struktury, oktetové pravidlo)
 - Geometrický vzorec
 - Konfigurační vzorec (stereochemie)
 - Konformační vzorec

https://cs.wikipedia.org/wiki/Chemick%C3%BD_vzorec

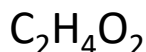
https://en.wikipedia.org/wiki/Chemical_formula

Základní vzorce

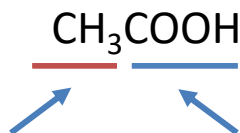
- **Stechiometrický vzorec** zaznamenává složení chemické sloučeniny bez ohledu na skutečný počet atomů v molekule. Stechiometrický zápis je možné zdůraznit uzavřením vzorce do složených závorek {}.



- **Sumární vzorec** (molekulový vzorec) chemické látky udává prvky, z nichž se látka skládá, a počet jejich atomů v molekule.



- **Funkční vzorec** je speciální zápis vzorce molekulového od něhož se liší tím, že pomocí symbolů prvků a číselných indexů jsou postupně zapisovány jednotlivé funkční skupiny.



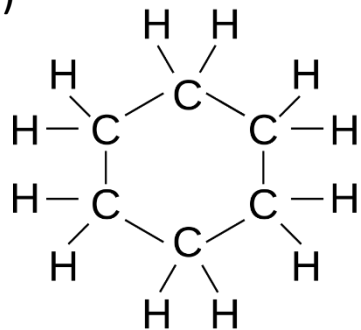
methylová a karboxylová skupina

Konstituční vzorec

Konstituční* vzorec je typ **strukturního vzorce** zobrazující propojení jednotlivých atomů pomocí spojovacích čar (jednoduchých, zdvojených či ztrojených úseček, v případě potřeby i zakřivených čar), znázorňující vazby mezi atomy (jednoduché, dvojně nebo trojně vazby). Přitom délka spojovacích úseček a úhly mezi sousedními úsečkami nevyjadřují ani skutečnou délku vazeb v molekule, ani úhly mezi vazbami.

Rozvinutý

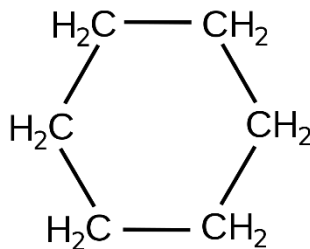
(zobrazuje všechny atomy a vazby)



cyklohexan

Racionální

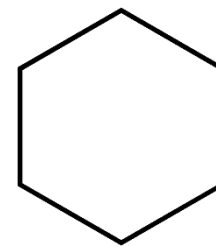
(zobrazuje všechny atomy a pouze některé vazby)



cyklohexan

Zjednodušený racionální

(zjednodušené zobrazení)



cyklohexan

***Konstituce** je popis identity a konektivity (a odpovídajících vazností či řádů vazeb) atomů v molekulární entitě (s vynecháním jakéhokoli rozdílu vyplývajícího z jejich prostorového uspořádání).

<https://goldbook.iupac.org/terms/view/C01282>

Elektronový vzorec

Elektronový vzorec je typ konstitučního vzorce, který se liší tím, že kromě chemických vazeb mezi atomy (kdy jedna úsečka představuje dvojici elektronů sdílenou dvěma sousedními atomy) vyznačuje i další elektrony valenčních sfér atomů, které se však nepodílejí na chemických vazbách mezi těmito atomy.

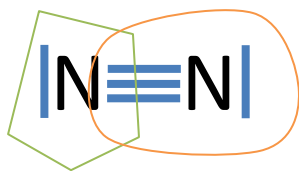
Jedná-li se o **volný elektronový pár**, pak se označuje **krátkou úsečkou** podél symbolu atomu. V případě **nepárového elektronu** pak pomocí **tečky** u symbolu příslušného atomu.

Při psaní elektronových vzorců je nutné zohlednit **počet valenčních elektronů** atomu dle skupiny v periodické tabulce a **oktetové pravidlo**.

Oktetové pravidlo odráží tendenci prvků hlavní skupiny se vázat tak, aby každý atom měl ve své valenční slupce právě osm elektronů (tj. konfiguraci vzácného plynu v dané periodě). Pravidlo neplatí univerzálně a má celou řadu výjimek.

molekula dusíku

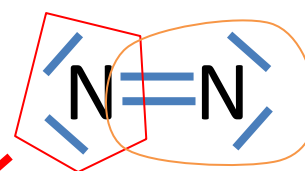
správně



5 valenčních elektronů
- atom dusíku

8 elektronů
- oktetové pravidlo

špatně



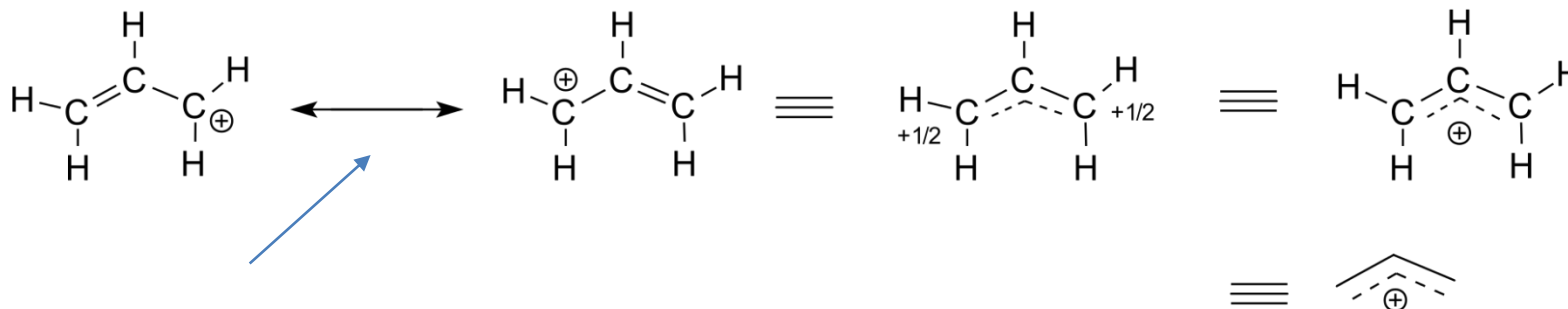
6 valenčních elektronů
- ~~NENÍ~~ atom dusíku

8 elektronů
- oktetové pravidlo

Rezonanční struktura

Rezonanční struktura je vzorec jedné z hraničních struktur dané sloučeniny. Rezonanční struktury se používají pro sloučeniny, jejichž strukturu nelze spolehlivě vyjádřit jedním vzorcem.

Jednotlivé rezonanční struktury mezi sebe neustále přecházejí (což se značí obousměrnou šipkou \leftrightarrow).



!!!! neznačí chemickou reakci !!!!
(např. rovnovážnou reakci, která se znázorňuje dvěma jednosměrnými šipkami)

Rezonanční hybrid je shrnutí rezonančních struktur do jednoho vzorce.

[https://en.wikipedia.org/wiki/Resonance_\(chemistry\)](https://en.wikipedia.org/wiki/Resonance_(chemistry))

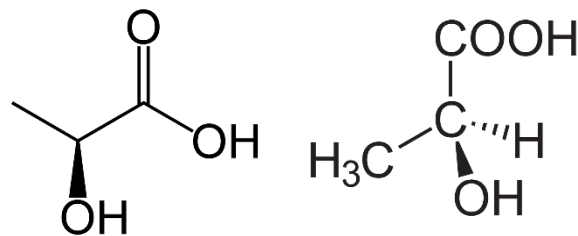
Geometrický vzorec

Geometrický vzorec pomocí jednoduchých grafických prostředků (průmětem do roviny papíru) znázorňuje skutečnou prostorovou stavbu molekuly.

Obvykle se vazby směřující před nákresnu znázorňují zesilujícím úzkým klínem, vazby ležící v rovině papíru normálními čarami a vazby směřující za nákresnu se kreslí tečkovaně nebo čárovaně či šrafovaně.

Konfigurační vzorec je speciální případ konstitučního vzorce, ve kterém je znázorněno specifické prostorové uspořádání např. *cis/trans* isomerie na dvojné vazbě v organických sloučeninách, nebo stereoizomerie látek s centrem asymetrie.

(S)-(+)-kyselina mléčná



Konformační vzorec zachycuje jednotlivé možnosti prostorového uspořádání molekuly, mezi nimiž může molekula přecházet v důsledku možného otáčení jejích částí kolem jednoduchých vazeb mezi vzájemně vázanými atomy.

Cvičení

1. Společné procvičování zápisu chemických vzorců na tabuli.

Software

Editor molekul je počítačový program pro vytváření a úpravu reprezentací chemických struktur.

Editory molekul mohou manipulovat s reprezentacemi chemických struktur buď v dvourozměrném či trojrozměrném prostoru prostřednictvím 2D či 3D počítačové grafiky.

- **dvourozměrný výstup** se používá jako ilustrace nebo k dotazování do chemických databází
- **trojrozměrný výstup** se používá k vytváření molekulárních modelů obvykle pro molekulární modelování

https://en.wikipedia.org/wiki/Molecule_editor

ChemSketch

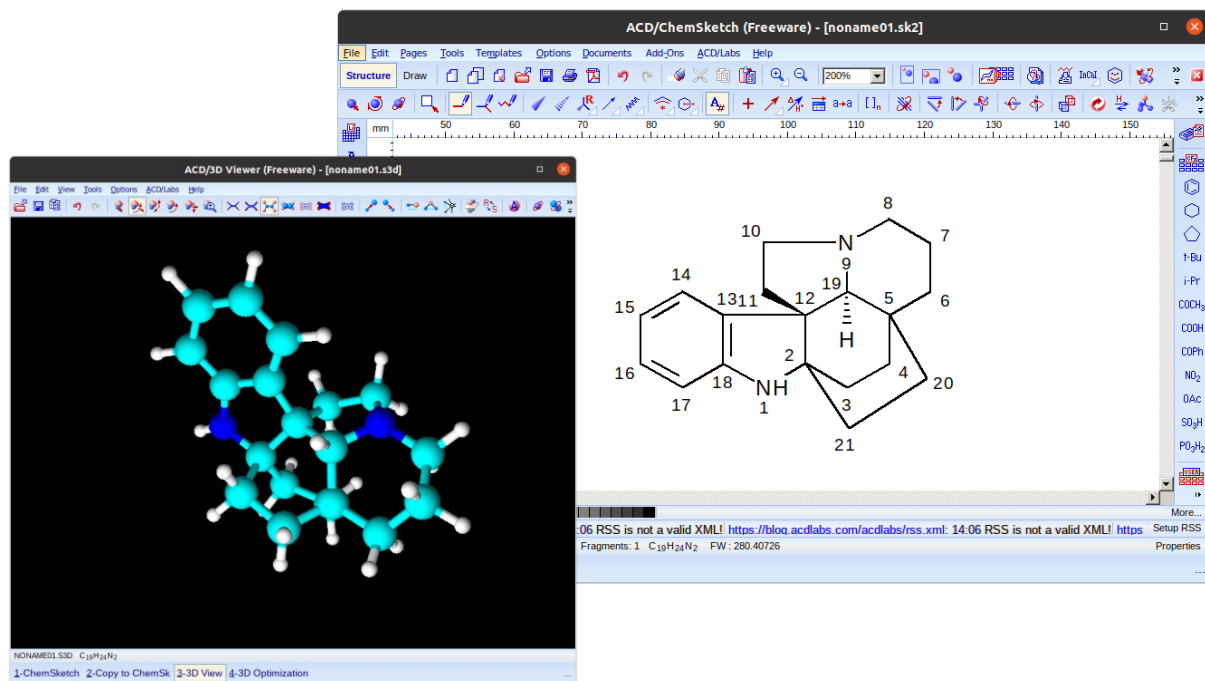
ACD/ChemSketch je program pro molekulární modelování, který slouží k vytváření a úpravě obrázků chemických struktur. K dispozici je také software, který umožňuje zobrazovat molekuly a molekulární modely ve dvou a třech rozměrech, pochopit strukturu chemických vazeb a povahu funkčních skupin.

Licence: proprietární (volně k akademickému použití)

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

Základní funkcionalita:

- chemické vzorce
- reakční schémata
- 3D modely (základní práce)
- laboratorní aparatury



OS: Windows, Linux (emulace přes wine)

Další software

- Marvin (Chemaxon, **academic and non-commercial use**)
- ChemDraw (ChemOffice, PerkinElmer)
- BIOVIA Draw (Biovia)
- XDrawChem (freeware)
- Ketcher (Epam)
- 2D Sketcher (ChemDoodle)

https://en.wikipedia.org/wiki/Molecule_editor

Jak spustit na klastru WOLF:

Softwarové moduly, které se spouští v terminálu (příkazové řádce):

ACD/ChemSketch

```
$ module add chemsk  
$ chemsk
```

Webové aplikace, které se spouštějí v prohlížeči:

Ketcher (<https://lifescience.opensource.epam.com/ketcher/>)

2D Sketcher (<https://web.chemdoodle.com/demos/2d-sketcher>)

Standardní aplikace, které se spouští z GNOME Menu nebo v terminálu

XDrawChem (xdrawchem)

Kalzium (kalzium)

není vhodné pro seriózní práci

Cvičení

Cvičení 1

1. Nakreslete strukturální vzorec kyseliny benzoové v následujících molekulových editorech:
 - Ketcher
 - 2D Sketcher
 - XDrawChem
 - ACD/ChemSketch (+zobrazte systematický název molekuly)
2. Ve zvoleném molekulovém editoru zobrazte strukturální vzorce následujících molekul:
 - 2-methylpropan
 - 4-chlorobut-2-yn-1-ol
 - ethanová kyselina
 - N-methylpyridinium chlorid
3. Ve zvoleném molekulovém editoru zobrazte Kekulého rezonanční struktury benzenu.
4. Ve zvoleném molekulovém editoru zobrazte rezonanční struktury acetátu.