

Il computer è uno strumento prezioso e viene ormai usato quotidianamente da milioni di persone. Per un chimico il computer è utile per eseguire operazioni ormai considerate normali come scrivere relazioni, fare presentazioni in Power Point, fare ricerche in rete, ma è utile anche per eseguire compiti più specifici.

A cosa serve il computer in Chimica?

- permette di creare immagini di molecole da inserire in relazioni e dispense;
- permette di creare modelli tridimensionali di molecole per meglio capirne la struttura e le proprietà;
- permette di attribuire la nomenclatura IUPAC ad una qualsiasi molecola e questo può aiutare a comprendere nei dettagli le regole IUPAC;
- permette di calcolare con ottima approssimazione le proprietà chimico-fisiche di una molecola assegnata e questo può essere utile per meglio comprendere le relazioni struttura-proprietà delle molecole;
- permette di prevedere gli stati normali di vibrazione di una molecola per prevedere lo spettro IR e quindi attribuire ad ogni picco la corrispondente oscillazione dei legami nella molecola;
- permette di calcolare lo spettro NMR di una molecola e questo si può rivelare molto prezioso per imparare ad interpretare gli spettri NMR;
- permette di calcolare e di rappresentare in 3D gli orbitali molecolari di una molecola utilizzando dei metodi matematici molto complessi di tipo quantomeccanico. Questo consente di prevedere la reattività della molecola nei confronti di un elettrofilo o di un nucleofilo o di valutarne la stabilità nei confronti di eventuali isomeri;
- permette di visualizzare sullo schermo il modello tridimensionale di proteine e DNA, queste sono molecole molto grandi che possono essere indagate nei dettagli e meglio comprese con l'aiuto del computer.

Come si può intuire, alcuni di questi utilizzi sono di tipo professionale. La cosa notevole, però, è che molti produttori di software professionale mettono a disposizione del grande pubblico, e di studenti e docenti in particolare, delle versioni ridotte e gratuite dei loro programmi, ma comunque sufficienti per realizzare in modo semplice alcune delle cose realizzabili con il programma professionale a pagamento.

Qui di seguito sono illustrati alcuni programmi di chimica che rappresentano una piccola panoramica del software disponibile sul mercato. Li possiamo considerare gli indispensabili per lo studente che si avvicina alla chimica. Sono tutti semplici da usare e di ottima qualità.

MDL Chime 2.6 - ServicePack7 (Vista compatibile)

Visualizza le molecole in 3D con Internet Explorer

Alcune pagine web di chimica contengono immagini tridimensionali di molecole possono essere ruotate e osservate da ogni posizione come se fossero veri oggetti tridimensionali, come nella figura qui sotto. Questi modelli tridimensionali di molecole sono generati da file scritti in formato pdb (protein data bank) che contengono le coordinate spaziali di ogni atomo della molecola. Purtroppo, però, Internet Explorer e gli altri browser più diffusi non sono in grado di leggere i file pdb.

Per rimediare a questo problema bisogna installare Chime 2.6, un piccolo programma (gratuito!) distribuito dalla MDL (vi sarà solo chiesto di compilare una scheda di registrazione).

<http://www.mdl.com/index.jsp> Dopo aver installato MDL Chime 2.6 in Internet Explorer (Firefox non è compatibile!), nel riquadro qui sotto vedrete una molecola tridimensionale. Cliccandola e trascinandola col mouse, la farete ruotare.

Accelrys DS Visualizer 2.01

Visualizza le molecole in 3D

Tra i programmi che permettono di vedere e manipolare le molecole in tre dimensioni, va segnalato anche DS Visualizer 2.01 (gratuito!!) che oltre alle molecole normali è particolarmente adatto a manipolare proteine, DNA e RNA.

DS Visualizer 2.01 si rivela potente e flessibile nello scegliere ed evidenziare ogni parte della molecola, offre molte opzioni di visualizzazione e produce immagini di buona qualità grafica.

<http://www.accelrys.com/products/dstudio/index.html>

Orbital Viewer

Mostra gli orbitali di atomi e molecole

Con questo programma si possono rappresentare tutti gli orbitali atomici per meglio comprenderne la forma e anche la struttura interna compresi i nodi. Si possono inoltre avvicinare due o più atomi fino ad ottenere molecole.

Il programma è disponibile gratuitamente al sito:
<http://www.orbitals.com/orb/ov.htm>

ISIS Draw 2.5 ServicePack4

Disegna molecole in 2D

Tra i molti programmi per disegnare molecole in 2d, forse il migliore è ISIS Draw 2.5 (gratuito!) distribuito da MDL. Si tratta di un programma completo ed efficace che permette in pochi secondi di disegnare molecole anche complesse dall'aspetto professionale per inserirle in dispense o appunti personali.

<http://www.mdl.com/index.jsp>

Il programma da scaricare va cercato nella finestra Download no-fee software.
Prima di scaricarlo vi verrà chiesto di compilare una scheda informativa.

ArgusLab 4.0

Disegna e visualizza molecole in 3d

Con questo ottimo programma distribuito (gratuitamente) da Mark Thompson della Planaria Software, è possibile sia creare sia importare molecole per esaminarle in 3 dimensioni con un'ottima qualità grafica. Si possono osservare anche grosse molecole come proteine, DNA ed RNA con un dettaglio grafico superiore a quello di Chime.

<http://www.arguslab.com>

Inoltre sono disponibili delle funzioni avanzate di calcolo per l'ottimizzazione tridimensionale delle molecole, per il calcolo della superficie degli orbitali HOMO e LUMO che permettono di indagare la reattività della molecola (vedi foto qui a lato), ed è possibile anche eseguire il calcolo della interazione di un Legando col Sito attivo di un enzima (Docking).

HyperChem 8.03

Programma professionale di modellistica molecolare.

Ottimo programma della Hypercube, disegna le molecole in 3D, ottimizza la loro struttura tridimensionale calcolandone l'energia minima utilizzando metodi di meccanica quantistica, ricava lo spettro IR delle molecole e per ogni frequenza assorbita mostra un'animazione delle vibrazioni molecolari. Mostra tutti gli orbitali di una molecola, sia quelli di legame che di antilegame e in particolare consente di valutare la struttura degli orbitali HOMO e LUMO per meglio comprendere la reattività delle molecole. Fa anche calcoli di termodinamica e di cinetica delle reazioni. Disegna in pochi istanti sequenze di amminoacidi, di nucleotidi o di zuccheri. Ha ottime capacità di rendering e offre immagini di qualità fotografica.

Si può ottenere una copia gratuita del programma valida per 10 giorni collegandosi al sito:

<http://www.hyper.com>

Chem Office Ultra 2010

Disegna molecole in 2D, assegna il nome IUPAC, calcola costanti chimico-fisiche, genera spettri NMR

Questo è un programma professionale che può essere provato gratuitamente per 15 giorni scaricandolo al sito:<http://www.cambridgesoft.com>

Svolge le funzioni di più programmi gratuiti insieme: disegna come ISIS Draw, calcola le costanti chimico fisiche come Chems sketch (è più completo), assegna il nome IUPAC come Chems sketch, traccia lo spettro NMR come gNMR (è più preciso nella previsione dei corretti chemical shift). Inoltre calcola la struttura 3D delle molecole, mostra gli orbitali molecolari, esegue calcoli quantomeccanici come Hyperchem.

Altri programmi interessanti

Spartan ottimo programma professionale di modellistica molecolare simile a Hyperchem. Usa metodi quantomeccanici avanzati e calcola spettri IR, spettri NMR, stati di transizione di reazioni e molto altro. Dispone di un database molto vasto con cui confrontare gli spettri calcolati.

Crocodile Chemistry simula un intero laboratorio chimico e permette di realizzare centinaia di reazioni ed esperienze di laboratorio e di seguirle osservando le variazioni di pH, temperatura, composizione, ecc.

Mestre 2.3 permette di trasformare un segnale FID prodotto da uno strumento di acquisizione di spettri NMR in uno spettro NMR leggibile applicando la Trasformata di Fourier. In rete si possono trovare i FID delle molecole desiderate che con Mestre si trasformano in spettri NMR veri, non simulati come quelli di gNMR o di ChemDraw.

Swiss PDB Viewer un altro ottimo visualizzatore di macromolecole (proteine, DNA) in formato Pdb. E' del tutto gratuito.

Chemsketch 12

Disegna molecole in 2D e le trasforma in 3D

Assegna il nome IUPAC

Disegna spettri NMR

Il programma più semplice ed immediato per creare modelli tridimensionali di molecole è probabilmente Chemsketch 12 distribuito (gratuitamente!) dalla ACD Labs. Con questo programma in pochi istanti è possibile disegnare una molecola in due dimensioni. Vedi foto qui a lato.

Si può anche generare il nome IUPAC della molecola se questa è composta da meno di 50 atomi.

Inoltre si possono ottenere peso molecolare, composizione percentuale, formula bruta, indice di rifrazione, densità, tensione superficiale, ecc.

Ma questo è solo il primo passo...

Si può far calcolare al computer un modello tridimensionale della molecola che può essere visto con il visualizzatore 3D interno di Chemsketch. Nella molecola 3d si può intervenire modificando lunghezze e angoli di legame, si possono anche modificare angoli di torsione e configurazioni R/S!

Inoltre la molecola 3D può essere salvata in formato mol (un formato analogo al pdb che è il formato universale per i modelli molecolari 3D) e quindi può essere visualizzata in altri programmi come Chime o ArgusLab 4.0 che ha migliori capacità di rendering. In questo modo si possono ottenere delle ottime immagini dall'aspetto fotografico.

E' compreso anche un programma per tracciare spettri NMR simulati! Dovete specificare però quanti tipi di idrogeni, il chemical shift, le costanti di accoppiamento J.

<http://www.acdlabs.com/download/>