olomol rychlý start

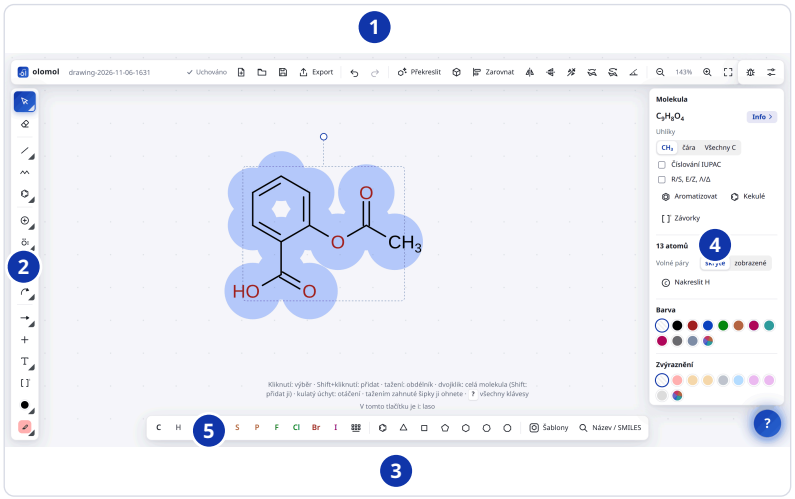
olomol je bezplatný nástroj na kreslení chemických struktur, reakcí a mechanismů. Běží celý v prohlížeči: nic se neinstaluje, funguje stejně ve Windows, na Macu i v Linuxu a je česky. Vznikl pro výuku na Katedře fyzikální chemie Univerzity Palackého v Olomouci jako alternativa k ChemSketchi, takže rozložení bude povědomé: nástroje vlevo, prvky a kruhy dole. Na vyzkoušení stačí čtvrt hodiny s těmito třemi stránkami.

1. Otevření

Otevřete adresu, kterou jste dostali, v Chromu, Edgi nebo Firefoxu.

Kresba se průběžně ukládá v prohlížeči, takže po zavření a novém otevření tam bude. Na důležité věci ale používejte uložit (`Ctrl+S`).

2. Okno



1. soubory, zpět, **Překreslit**, **Otočit ve 3D**, **Zarovnat**, překlopení
2. kreslicí nástroje (trojúhelníček v rohu: další varianty)
3. prvky, kruhy, **Šablony**, **Název / SMILES**
4. panel s vlastnostmi toho, co je vybrané (bod 5)
5. nápověda k nástroji; `?` ukáže všechny klávesy

3. První molekula

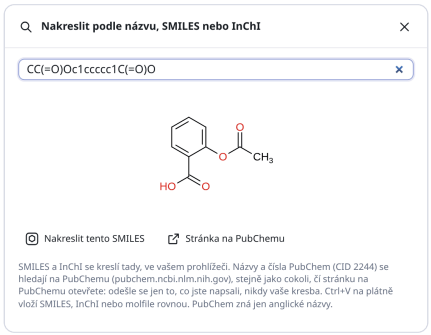
1. V dolní liště klikněte na benzen a pak na plátno.
2. Vlevo zvolte jednoduchou vazbu `/` a klikněte na jeden roh kruhu: vyroste nová vazba.
3. Najeďte myší na její volný konec a stiskněte `0`. Máte fenol.

Klávesy nad atomem mění prvek (`N`, `O`, `S`, `L` je Cl…), nad vazbou `1` `2` `3` mění její řád. Stejné písmeno nad prázdným místem zvolí **kreslení tím prvkem**: kliknutí na atom ho změní, `Shift`+kliknutí připojí nový, `C` vrátí uhlík. Náboj přidáte nástrojem náboje ⊕ vlevo (ve variantách je i záporný, δ+ a δ−), nebo klávesou `+` či `−` nad atomem. `Ctrl+Z` vrací zpět.

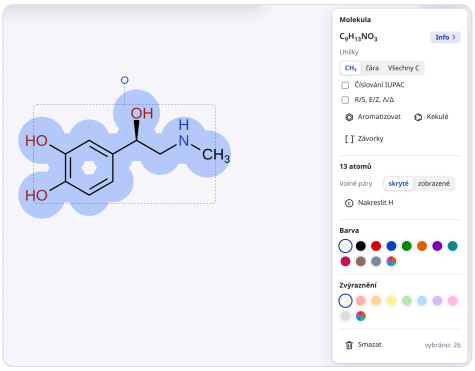
4. Struktura podle názvu nebo SMILES

Klikněte na **Název / SMILES** (nebo stiskněte `/`) a napište SMILES, InChI nebo název, třeba `aspirin`. SMILES se nakreslí hned, jak píšete. Stiskněte `Enter` a klikněte, kam má molekula přijít.

SMILES a InChI se zpracují ve vašem počítači. Názvy se hledají v databázi PubChem (potřebuje internet a zná jen anglické názvy); odešle se jen napsaný text, nikdy vaše kresba. SMILES zkopírovaný odjinud stačí vložit na plátno přes `Ctrl+V`.



5. Panel molekuly



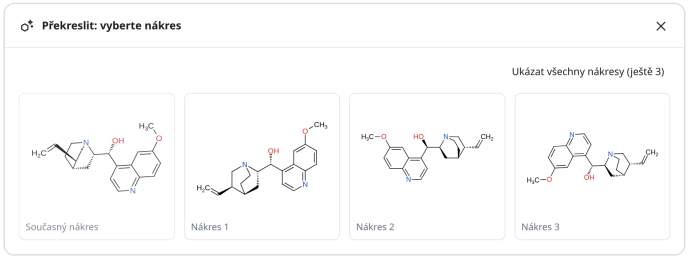
Dvojklikem vyberte molekulu. Panel vpravo ukáže, co s ní jde dělat:

- **vzorec** a vedle něj **Info**: hmotnosti, HRMS, elementární analýza, SMILES a InChI ke zkopírování,
- **Uhlíky**: CH_3 napsané, jen **čára**, nebo **Všechny C**,
- **Číslování IUPAC** očísluje hlavní řetězec a napíše proč,
- **Aromatizovat** nakreslí v aromatických kruzích kroužek, **Kekulé** ho vrátí,
- **Závorky** kolem molekuly (tranzitní stav, ion),
- **Volné páry** **skryté** / **zobrazené** a **Nakreslit H** (vodíky jako atomy, pro šipky),
- **Barva** čar a písma, **Zvýraznění** (barevný podklad) a **Smazat**.

Když vyberete jen atom nebo vazbu, panel ukáže i jejich prvek, náboj, vodíky, řád nebo klín.

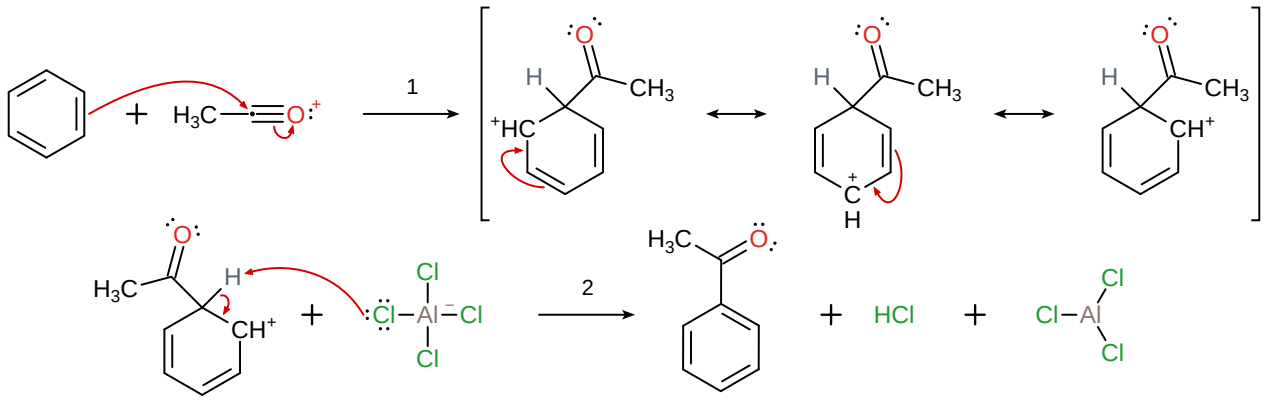
6. Překreslit: hezčí nákres jedním kliknutím

Molekula vložená ze SMILES nebo nakreslená narychlo nemusí vypadat hezky. Vyberte ji a v horní liště klikněte na **Překreslit**. Program nabídne několik nákresů a upozorní na křížící se vazby. Ten, který se vám líbí, vyberete kliknutím. Žádný nákres nezmění molekulu ani její stereochemii a Ctrl+Z ho vrátí.



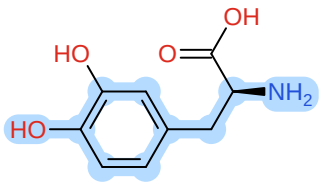
7. Jednoduchý mechanismus

Zahnuté šipky jsou součástí kresby: drží u svých atomů a vazeb, a když molekulu posunete nebo změníte, překreslí se samy. Takhle vypadá Friedelova–Craftsova acylace benzenu ve dvou krocích, s mezomerními strukturami σ-komplexu:

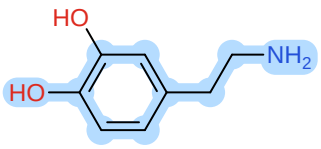


- Zahnutá šipka (nástroj vlevo, A): táhněte od elektronů, tedy od vazby nebo atomu s volným párem, tam, kam jdou. Kudy šipku vést, si program spočítá; když se vám nelíbí, táhněte za ni nebo v panelu klikněte na **Jinak**.
- Volné páry (:): klikněte na atom. Kolik jich je, se odvodí z vazeb a náboje.
- Rezonanční šipka je ve variantách reakční šipky, závorky [] (K) jsou nástroj vlevo: táhněte obdélník kolem mezomerních struktur.

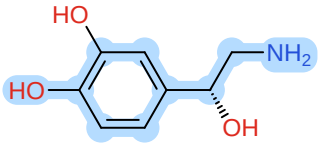
8. Barvy, zvýraznění a mřížka



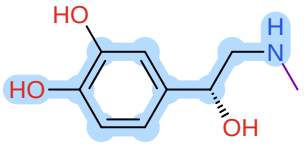
L-DOPA



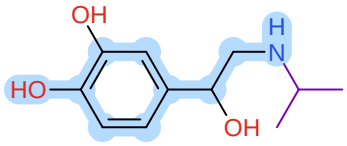
dopamin



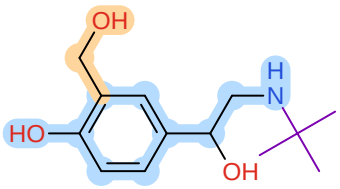
noradrenalin



adrenalin



isoprenalin



salbutamol

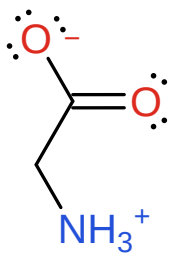
Šest katecholaminů a příbuzných léčiv. Všechny mají **modře zvýrazněnou** stejnou společnou část, nakreslenou stejně natočenou. Salbutamol (lék na astma) má **oranžově zvýrazněnou** hlavní odlišnost: místo jedné skupiny OH má CH_2OH, enzym COMT ho proto neodbourává a působí hodiny, ne minuty. **Fialově obarvené** jsou skupiny na dusíku: čím větší, tím víc látka působí na β-receptory.

1. Nakreslete první molekulu, zkopírujte ji (Ctrl+C, Ctrl+V) a kopii upravte. Společná část tak zůstane všude stejně natočená.
2. Vyberte vše (Ctrl+A), v **Zarovnat** zadejte 3 **Sloupce** a klikněte na **Uspořádat do mřížky**.
3. **Zvýraznění:** vyberte atomy (tažením obdélníku, Shift+kliknutím) a v panelu klikněte na barvu v **Zvýraznění**. Nebo použijte zvýrazňovač vlevo dole a klikejte na atomy a vazby.
4. **Barva čar a písma:** stejně, jen v panelu **Barva**, nebo nástroj (vlevo dole, varianty v rohu).

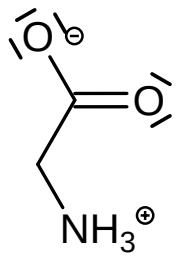
9. Vzhled: náboje, volné páry, barvy

Nastavení (vpravo nahoře) mění vzhled celé kresby i exportovaných obrázků:

- **Náboje**: + −, nebo v kroužku ⊕ ⊖,
- **Volné páry**: **Tečky** ·, nebo **Čárky (Lewis)**, jak se často učí u nás,
- **Barvy atomů**: **Podle prvku**, nebo **Černé** (vlastní barvy a zvýraznění zůstanou),
- dále **Styl** **ACS 1996** pro časopisy, **Uhlíky**, **Aromáty** (kroužek nebo čárkovaně); označení R/S a E/Z se zaškrtává v panelu u molekuly.



výchozí



⊕ ⊖, čárky, černé

10. Uložit, exportovat, vložit do Wordu

- Uložit (Ctrl+S) uloží kresbu jako soubor KET, který se tu zase otevře se vším, i se šipkami a barvami.
- **Kopírovat jako obrázek** (Ctrl+Shift+C) dá kresbu (nebo výběr) do schránky. Ve Wordu nebo PowerPointu ji vložte přes Ctrl+V.
- **Export** nabízí SVG (vektorový obrázek pro Inkscape a tisk), PNG a soubory molfile, SDF, SMILES a další. **Kopírovat odkaz** tamtéž udělá odkaz, ve kterém je kresba přímo uložená.

11. Problém nebo nápad?

Budeme rádi za každou zprávu. Klikněte na brouka vpravo nahoře: **Napsat e-mail** otevře e-mail na jan.salomon@upol.cz i s verzí programu a prohlížečem; napište, co jste dělali a co se stalo. Odkaz na kresbu je na e-mail moc dlouhý: **Kopírovat tabulku** ho zkopíruje i s tabulkou, vložte ho na konec e-mailu. V nápovědě jsou také příklady (u každé části kresby řeknou, jak se kreslí) a v jejím záhlaví tento návod i podrobná *Příručka*. Tlačítko **Ukázky na videu** v ní ukáže pět krátkých videí z práce v programu.