



Strutture Chimiche - Programmi

- **ChemDraw (ChemOffice)** - \$\$\$ più completo e avanzato
- **ChemSketch** (free) semplice ma limitato
- **IsisDraw/BioviaDraw** (free) semplice e un po' più completo

Per proteine/macromolecole:

- Chimera - free
- VMD (Visual Molecular Dynamics) - free
- RasMol
- Biovia DS Visualizer

https://www.pianetachimica.it/computer/computer_chi.htm



ChemSketch

E' uno dei programmi più semplici per disegnare molecole e trovare il loro **nome IUPAC** (se hanno meno di 50 atomi).

Permette di vedere alcuni dati della molecola disegnata, quali ad es. peso molecolare, formula bruta, densità, indice di rifrazione, tensione superficiale, ecc.

Permette di creare il **modello 3D** della molecola e anche di effettuare alcuni cambiamenti sui legami (lunghezze, angoli, torsioni, ecc.)

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



ChemSketch

ACD/ChemSketch (Freeware) - [noname01.sk2]

File Edit Pages Tools Templates Options Documents Add-Ons ACD/Labs Help

Structure Draw [Icons] Page Wid [Icons]

mm 0 10 20 30 40 50 60 70 80 90 100 110 120 130 140 150 160 170 180 190 200 210 220

A
Any
C
H
N
O
F
Na
T
R¹
+
I
A^Q
H
#

CFE
[Icons]
t-Bu
i-Pr
COCH₃
COOH
COPh
NO₂
OAc
SO₃H
PO₃H₂
More...

Generate Name for Structure
InChI for Structure
SMILES Notation
3D Viewer

ACD/Labs Blog: Oct 9 16:01 Partners in Success - How ACD/Labs works with its customers for mutual success Sep 17 07:30 The Strength of Chemistry Bonds (as Measured by Employee Satisfaction) Sep 3 07:57 1 Setup RSS
NONAME01.SK2 Modified Page 1/1 Fragments: 1 C₆H₆ FW: 78.11184
Properties

1-ChemSketch 2-Database 3-I-Lab



IsisDraw (old)- BioviaDraw (new)

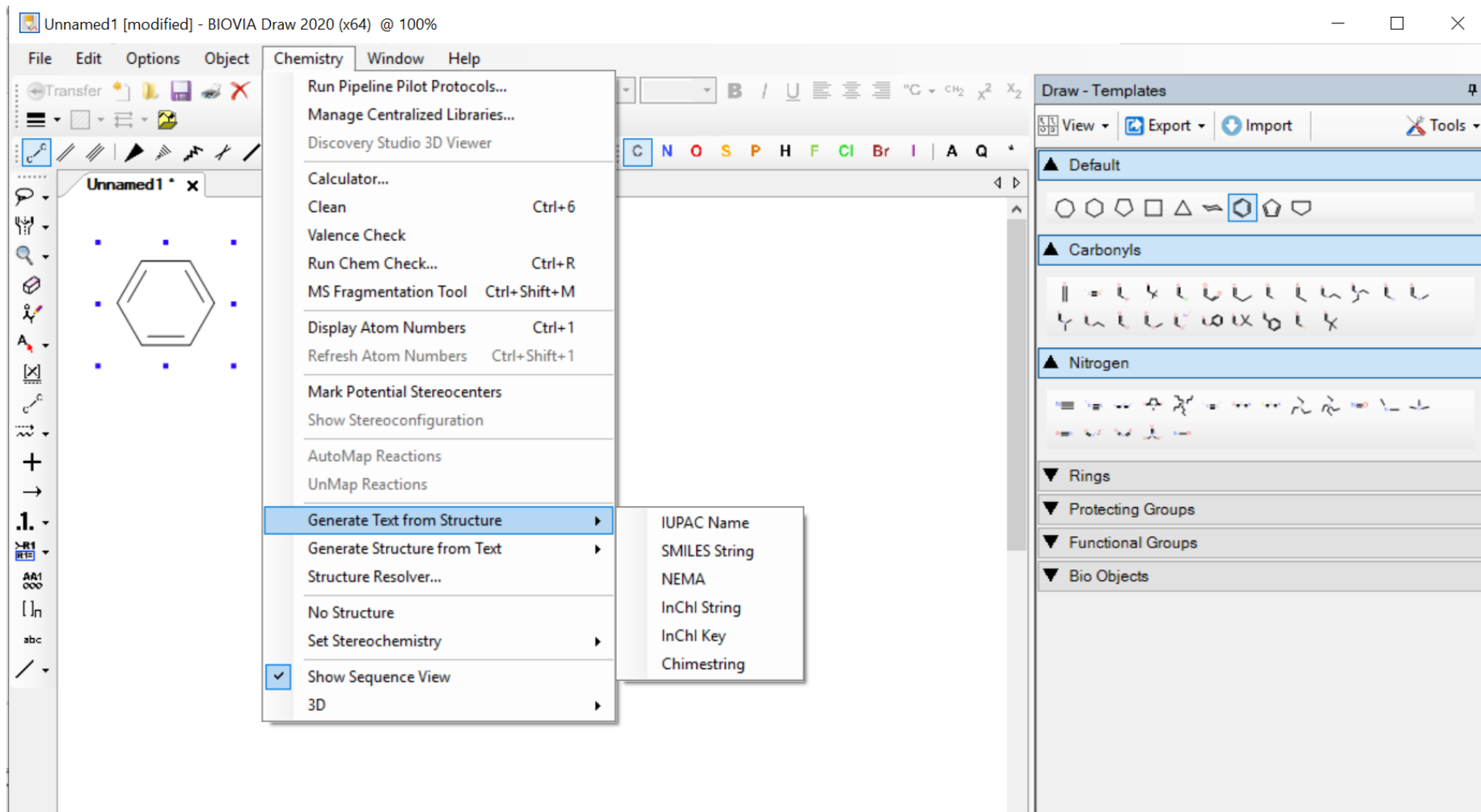
IsisDraw è un programma abbastanza completo e semplice per disegnare velocemente anche molecole complesse.

NON è compatibile con **Windows 10** (in questo caso si usa la nuova versione BioviaDraw).

IsisDraw è **OK** per **Windows 7** se impostate la compatibilità con WinXP (pulsante destro - proprietà - compatibilità - Win XP)

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

IsisDraw (old)- BioviaDraw (new)



The screenshot displays the BioviaDraw 2020 software interface. The main window shows a chemical structure of benzene. The 'Chemistry' menu is open, highlighting the 'Generate Text from Structure' option. A sub-menu is visible, listing various text generation options:

- IUPAC Name
- SMILES String
- NEMA
- InChI String
- InChI Key
- Chimestring

The interface includes a top menu bar (File, Edit, Options, Object, Chemistry, Window, Help), a toolbar with drawing tools, a central canvas with the benzene structure, and a right-hand panel titled 'Draw - Templates' containing categories like Default, Carbonyls, Nitrogen, Rings, Protecting Groups, Functional Groups, and Bio Objects. The status bar at the bottom shows the sequence 'C N O S P H F Cl Br I | A Q'.

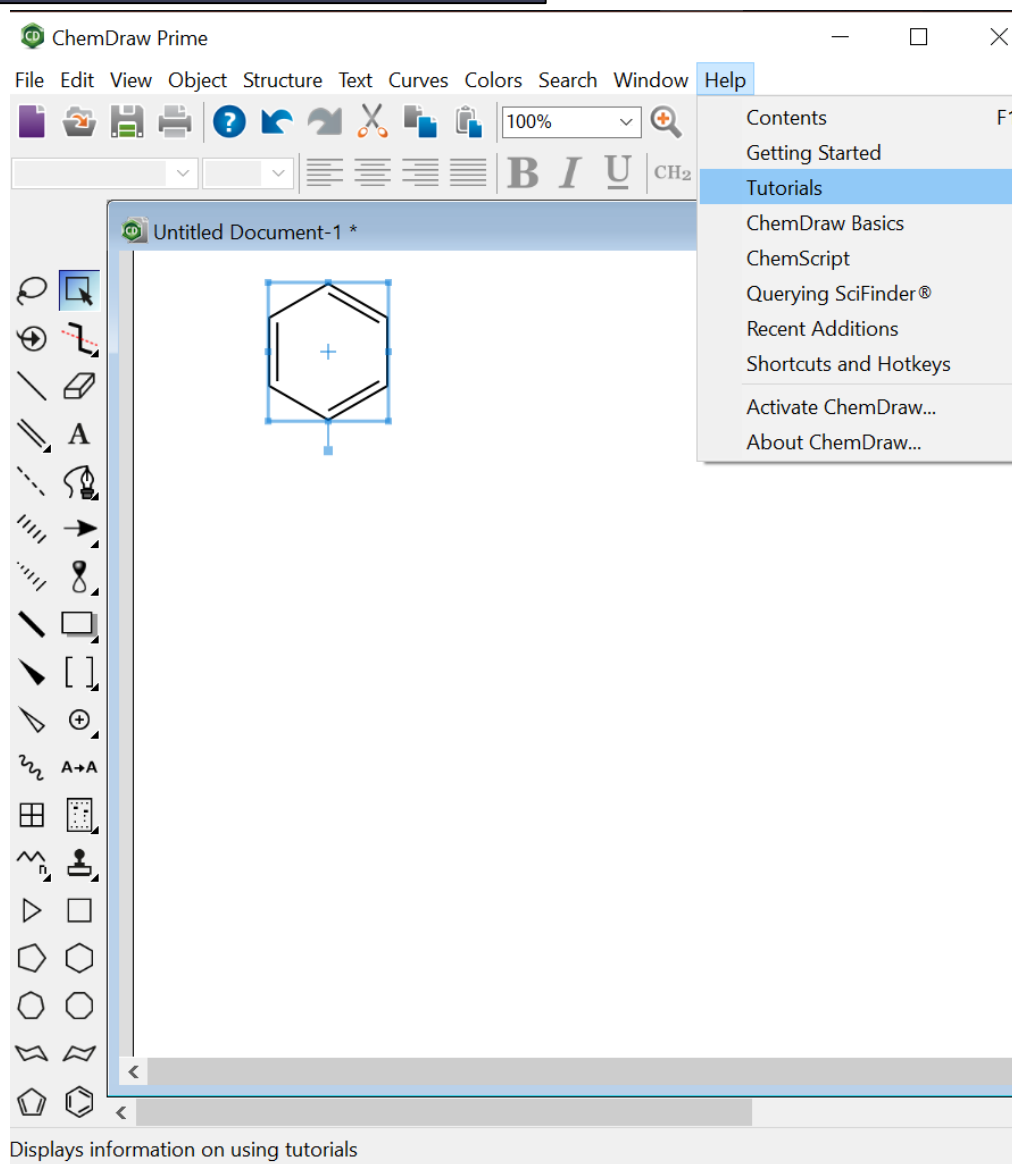
ChemDraw

E' il software professionale
d'elezione dei chimici

Molto usato soprattutto dai
chimici organici per
rappresentare strutture,
reazioni, orbitali, ecc.

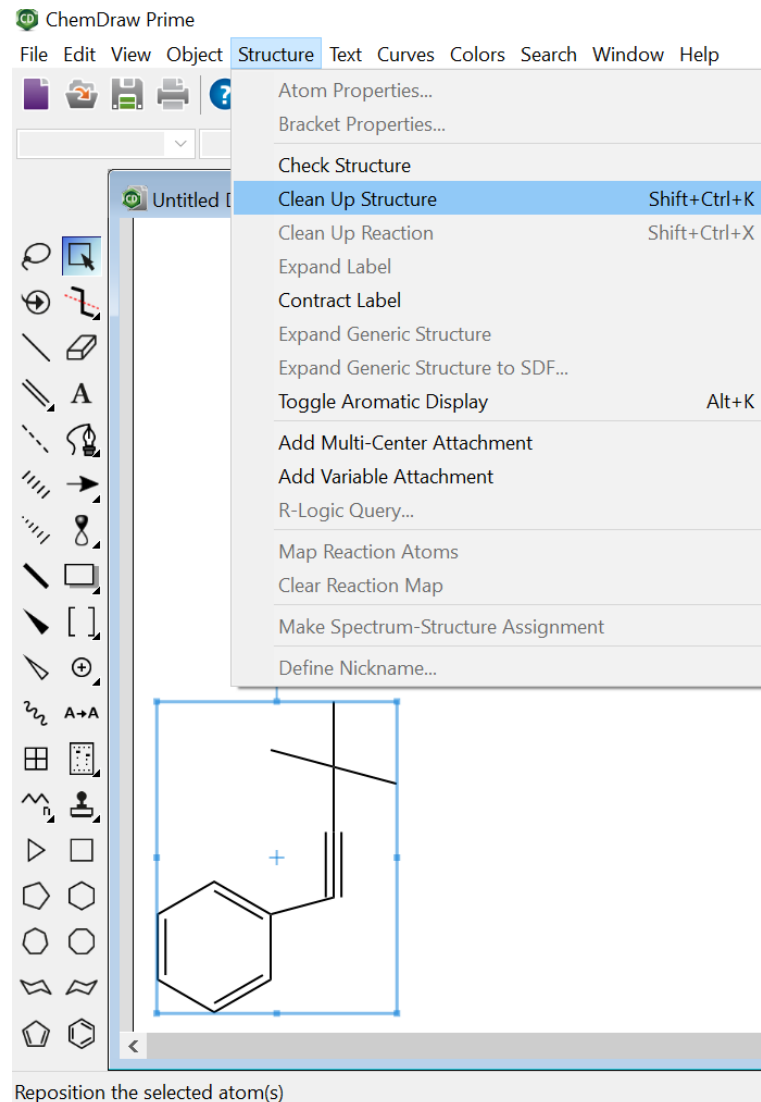
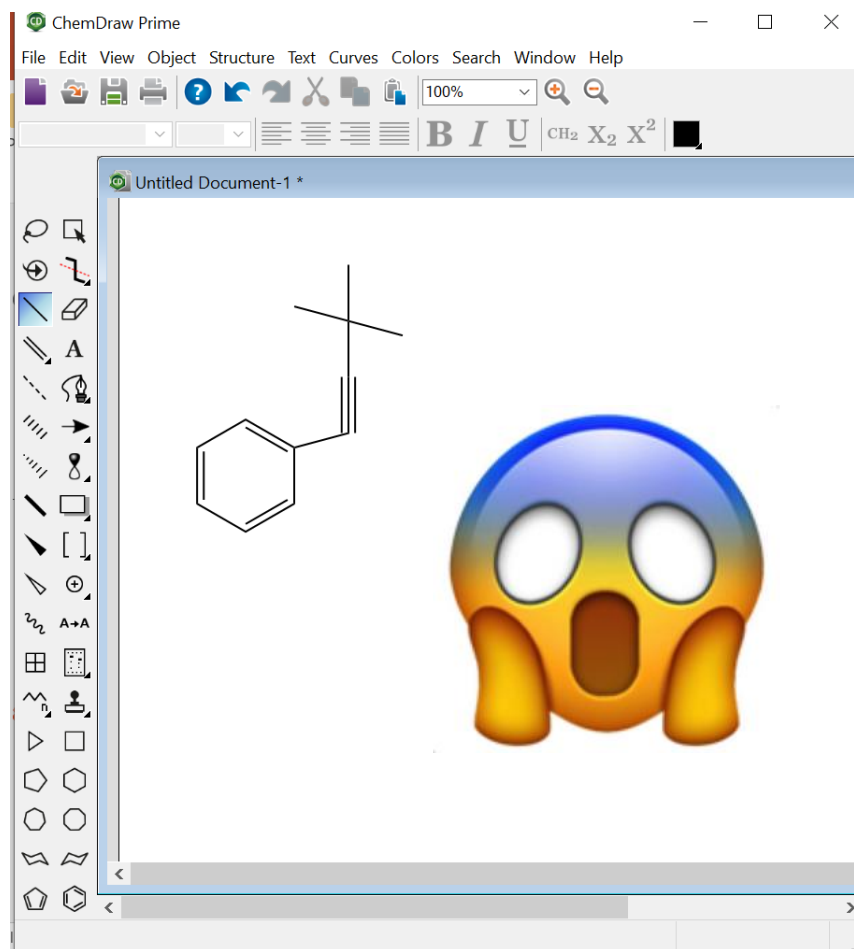
Su Moodle2 troverete 2
video:

- Tutorial base
- Comandi veloci



ChemDraw

ATTENZIONE AGLI ANGOLI DI LEGAME!!!



ChemDraw Prime interface showing the 'Structure' menu with 'Clean Up Structure' highlighted. A blue box highlights the chemical structure in the main window, and a caption below reads 'Reposition the selected atom(s)'.

ChemDraw Prime

File Edit View Object Structure Text Curves Colors Search Window Help

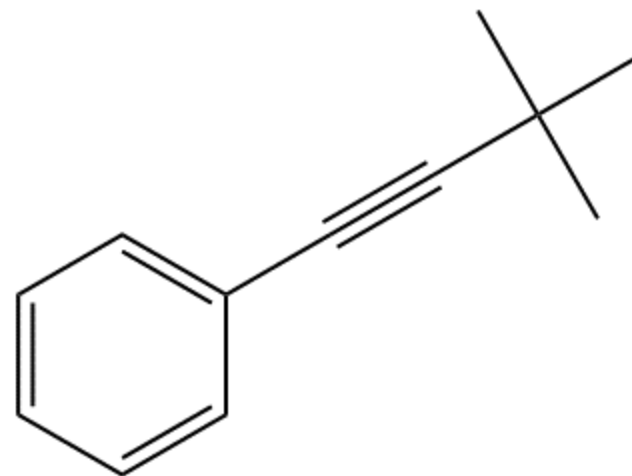
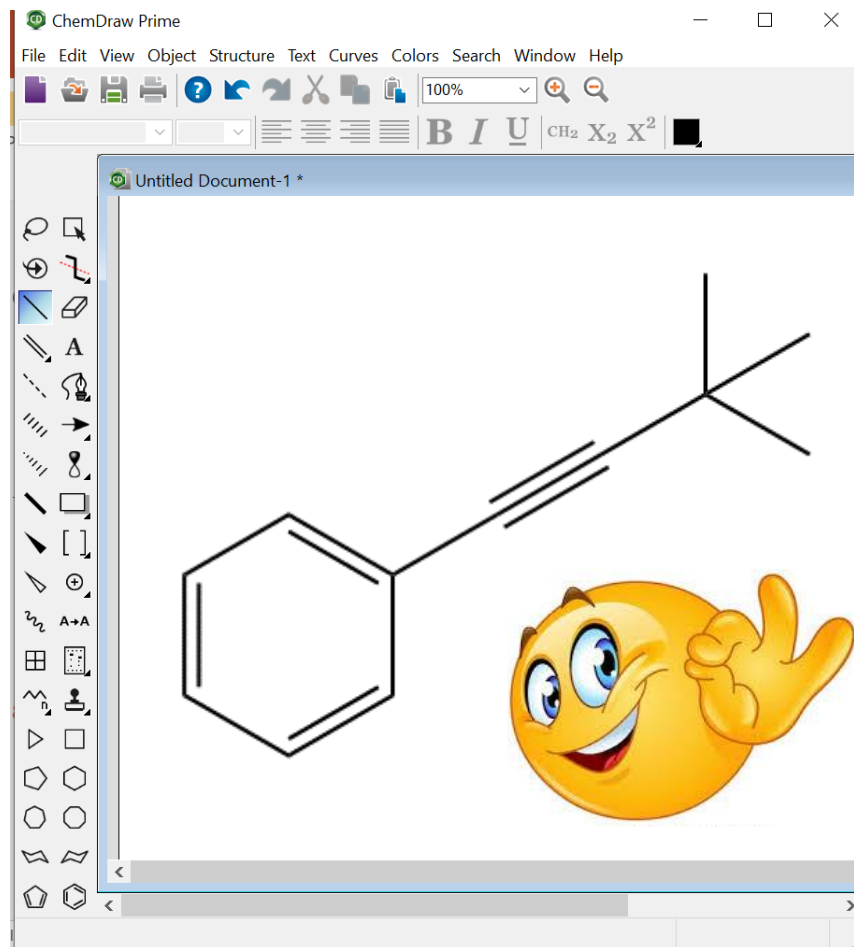
- Atom Properties...
- Bracket Properties...
- Check Structure
- Clean Up Structure** Shift+Ctrl+K
- Clean Up Reaction Shift+Ctrl+X
- Expand Label
- Contract Label
- Expand Generic Structure
- Expand Generic Structure to SDF...
- Toggle Aromatic Display Alt+K
- Add Multi-Center Attachment
- Add Variable Attachment
- R-Logic Query...
- Map Reaction Atoms
- Clear Reaction Map
- Make Spectrum-Structure Assignment
- Define Nickname...

Reposition the selected atom(s)

ChemDraw



ATTENZIONE AGLI ANGOLI DI LEGAME!!!





ChemDraw

ChemDraw Prime

File Edit View **Object** Structure Text Curves Colors Search Window Help

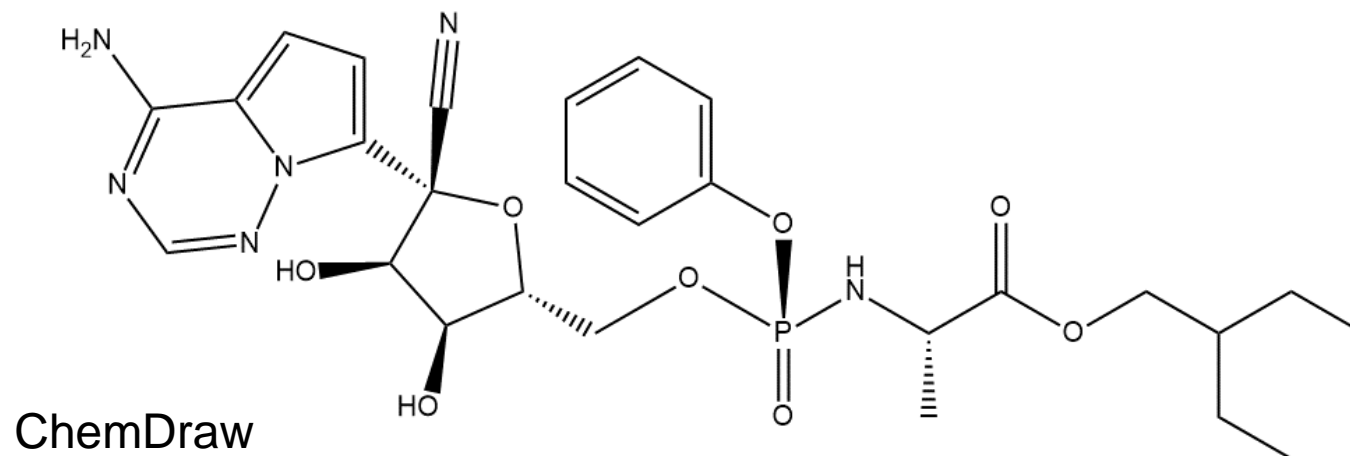
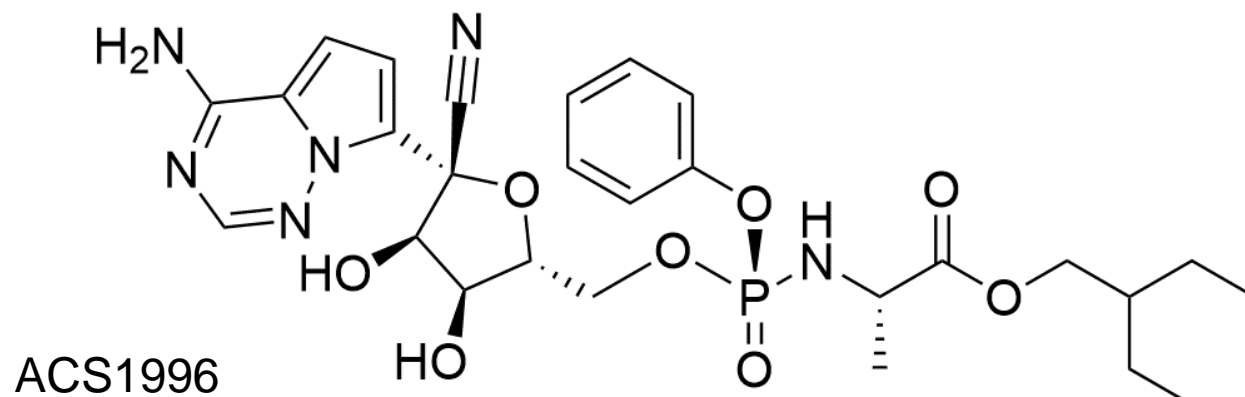
Object Settings...
Apply Object Settings from >
✓ Fixed Lengths Ctrl+L
✓ Fixed Angles Ctrl+E
Show Stereochemistry
Attach Data...
Annotate...
Center on Page
Align >
Distribute >
Add Frame >
Group Ctrl+G
Ungroup Shift+Ctrl+G
Join Ctrl+J
Bring to Front F2
Send to Back F3
Flatten
Flip Horizontal Shift+Ctrl+H
Flip Vertical Shift+Ctrl+V
Rotate 180° Horizontal Alt+Shift+Ctrl+H
Rotate 180° Vertical Alt+Shift+Ctrl+V
Rotate... Ctrl+R
Scale... Ctrl+K

Other...
Current Document
ACS Document 1996
Adv. Synth. Catal. Document
I Draw Styles
J. Chin. Chem. Soc. Document
J. Het. Chem
J. Mol. Mod. (1 Column)
J. Mol. Mod. (2 Column)
Nature Research Document
New A4 Document
New Document
New Slide
Phytomedicine Document
RSC (1 Column) Document
RSC (2 Column) Document
Science of Synthesis
Show Terminal Carbon Labels
SYNTHESIS, SYNLETT Document
Verlag Helv. Chim. Acta Doc
Wiley Document

The image shows the ChemDraw Prime software interface. The 'Object' menu is open, displaying a list of object settings and a sub-menu for 'Apply Object Settings from'. The sub-menu is currently open, showing a list of document styles, with 'ACS Document 1996' selected. In the background, a chemical structure is visible, consisting of a benzene ring attached to an ethynyl group, with a terminal carbon atom highlighted by a blue selection box.

ChemDraw



Ad es. Remdesivir




ChemDraw - InChI

ChemDraw Prime

File Edit View Object Structure Text Curves Colors Search Window Help

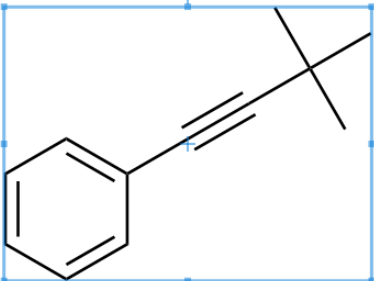
100%  

B *I* U CH₂ X₂ X² 

Undo Move Ctrl+Z
Redo not available Shift+Ctrl+Z
Cut Ctrl+X
Copy Ctrl+C
Paste Ctrl+V
Clear Del
Select All Ctrl+A
Invert Selection Shift+Ctrl+I
Repeat Move Ctrl+Y

Copy As >
Paste Special >
Insert File...
Insert Object...
Object

SMILES Alt+Ctrl+C
SLN
InChI
InChI Key
CDXML Text Ctrl+D
MOL Text Alt+Shift+Ctrl+O
MOL V3000 Text Alt+Ctrl+O



Copy the selected structure(s) to the clipboard as an InChI string

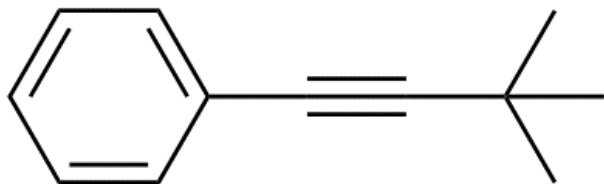
InChI

International Chemical Identifier

Codice sviluppato da IUPAC per contenere le info di una struttura chimica e facilitarne la ricerca in database e la scrittura.

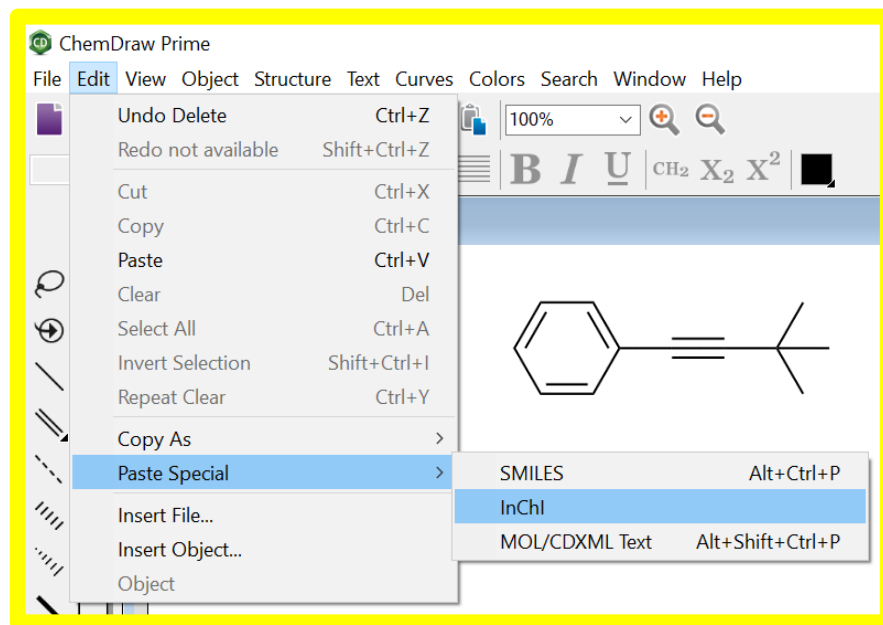
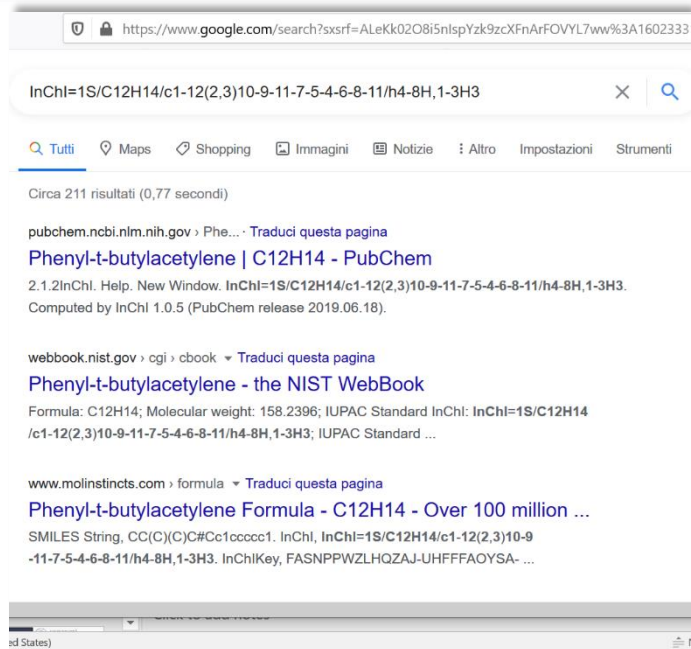
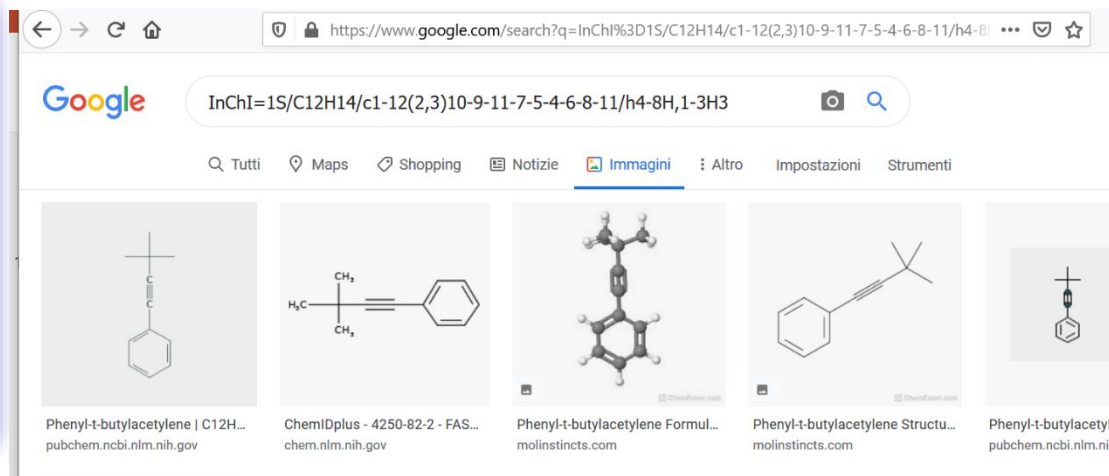
Contiene STRATI di informazione (atomi e loro connessione, tautomeria, stereochimica, ecc.). Incollando la stringa InChI su:

- 1) ChemDraw, compare la struttura
- 2) motori di ricerca, i risultati riconducono al composto



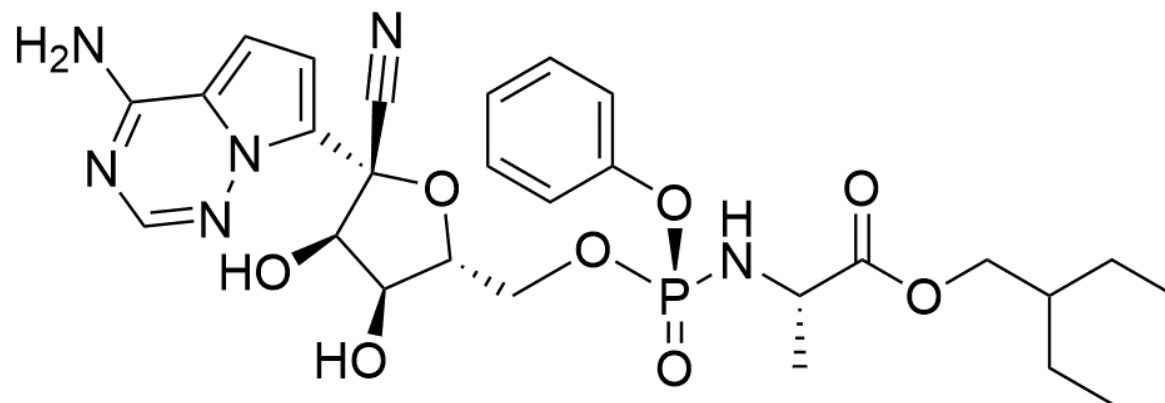
InChI=1S/C12H14/c1-12(2,3)10-9-11-7-5-4-6-8-11/h4-8H,1-3H3

InChI



InChI

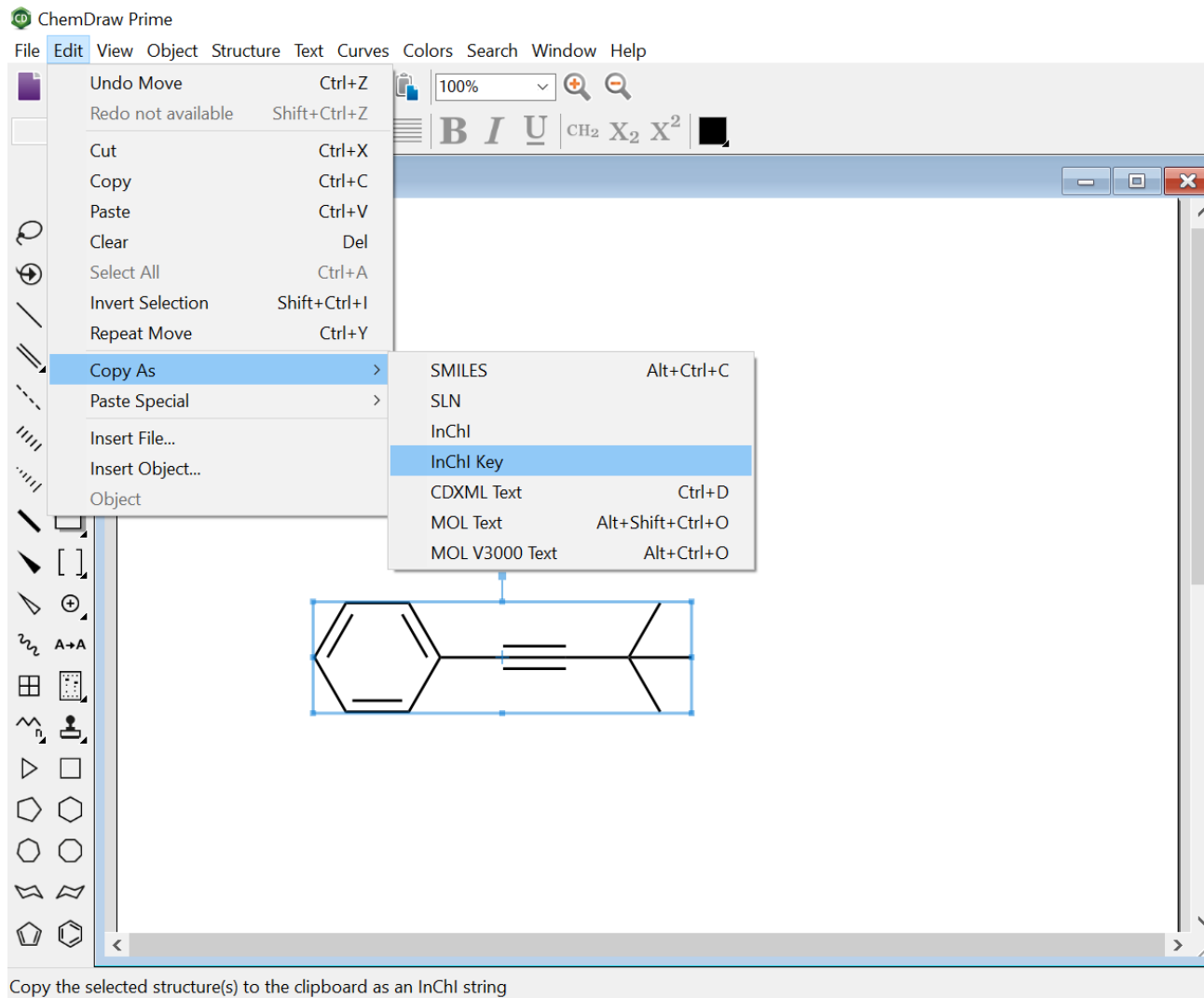
Ad es. Remdesivir



InChI=1S/C27H35N6O8P/c1-4-18(5-2)13-38-26(36)17(3)32-42(37,41-19-9-7-6-8-10-19)39-14-21-23(34)24(35)27(15-28,40-21)22-12-11-20-25(29)30-16-31-33(20)22/h6-12,16-18,21,23-24,34-35H,4-5,13-14H2,1-3H3,(H,32,37)(H2,29,30,31)/t17-,21+,23+,24+,27-,42-/m0/s1

InChI Key RWWYLEGWBNMMLJ-YSOARWBDSA-N

ChemDraw – InChI Key



The screenshot shows the ChemDraw Prime interface. The 'Edit' menu is open, and the 'Copy As' option is selected, which has opened a sub-menu. In this sub-menu, the 'InChI Key' option is highlighted. The main drawing area contains a chemical structure of a benzene ring connected to a triple bond, which is further connected to a branched alkyl chain. The structure is currently selected with a blue bounding box. The status bar at the bottom of the window reads: 'Copy the selected structure(s) to the clipboard as an InChI string'.

ChemDraw Prime

File Edit View Object Structure Text Curves Colors Search Window Help

Undo Move Ctrl+Z
Redo not available Shift+Ctrl+Z
Cut Ctrl+X
Copy Ctrl+C
Paste Ctrl+V
Clear Del
Select All Ctrl+A
Invert Selection Shift+Ctrl+I
Repeat Move Ctrl+Y

Copy As >
Paste Special >
Insert File...
Insert Object...
Object

SMILES Alt+Ctrl+C
SLN
InChI
InChI Key
CDXML Text Ctrl+D
MOL Text Alt+Shift+Ctrl+O
MOL V3000 Text Alt+Ctrl+O

Copy the selected structure(s) to the clipboard as an InChI string

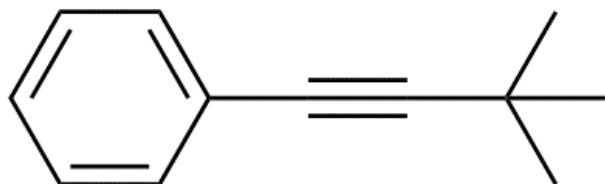
InChI Key

Codice a 27 caratteri non comprensibile per gli umani

Creato per facilitare ricerche sul web (quando InChI è troppo lungo)

Posso “incollare” codice sui motori di ricerca, ma non su ChemDraw per creare la struttura.

NB: piccola probabilità (non nulla) dello stesso codice per più molecole



FASNPPWZLHQZAJ-UHFFFAOYSA-N

InChI Key

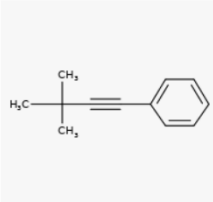
NB: risultati diversi da InChI sui motori di ricerca


Google

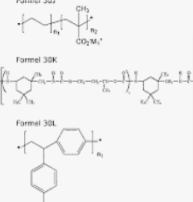
FASNPPWZLHQZAJ-UHFFFAOYSA-N

Tutti Maps Immagini Notizie Shopping Altro Impostazioni Strumenti

organic solar cells chemical compound 30I solar cell thin film materials diphenylacetylene 10


ChemIDplus - 4250-82-2 - F...
chem.nlm.nih.gov


Sulfur-mediated difunctionalization of internal and ter...
sciencedirect.com


DE102011054246A1 - Org...
patents.google.com

FASNPPWZLHQZAJ-UHFFFAOYSA-N

Tutti Maps Immagini Notizie Shopping Altro Impostazioni Strumenti

Circa 166 risultati (0,34 secondi)

chem.nlm.nih.gov › chemidplus · Traduci questa pagina
ChemIDplus - FASNPPWZLHQZAJ-UHFFFAOYSA-N
4250-82-2 - FASNPPWZLHQZAJ-UHFFFAOYSA-N - Phenyl-t-butylacetylene - Similar structures search, synonyms, formulas, resource links, and other chemical ...

spectrabase.com › spectrum · Traduci questa pagina
FASNPPWZLHQZAJ-UHFFFAOYSA-N - ¹³C NMR Chemical Shifts
...
13C Nuclear Magnetic Resonance (NMR) Chemical Shifts of FASNPPWZLHQZAJ-UHFFFAOYSA-N with properties.

webbook.nist.gov › cgi › cbook · Traduci questa pagina
Phenyl-t-butylacetylene - the NIST WebBook
... IUPAC Standard InChIKey: FASNPPWZLHQZAJ-UHFFFAOYSA-N; CAS Registry Number: 4250-82-2; Chemical structure: C12H14 View the 3d structure.

Slide 17 of 17 English (United States)

ChemDraw - SMILES

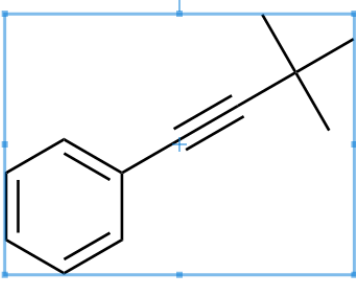
ChemDraw Prime

File Edit View Object Structure Text Curves Colors Search Window Help

Undo Move Ctrl+Z
Redo not available Shift+Ctrl+Z
Cut Ctrl+X
Copy Ctrl+C
Paste Ctrl+V
Clear Del
Select All Ctrl+A
Invert Selection Shift+Ctrl+I
Repeat Move Ctrl+Y

Copy As >
Paste Special >
Insert File...
Insert Object...
Object

SMILES Alt+Ctrl+C
SLN
InChI
InChI Key
CDXML Text Ctrl+D
MOL Text Alt+Shift+Ctrl+O
MOL V3000 Text Alt+Ctrl+O



CC(C)(C#CC1=CC=CC=C1)C

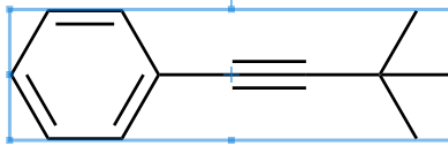
ChemDraw Prime

File Edit View Object Structure Text Curves Colors Search Window Help

Undo Paste Ctrl+Z
Redo not available Shift+Ctrl+Z
Cut Ctrl+X
Copy Ctrl+C
Paste Ctrl+V
Clear Del
Select All Ctrl+A
Invert Selection Shift+Ctrl+I
Repeat Paste SMILES Ctrl+Y

Copy As >
Paste Special >
Insert File...
Insert Object...
Object

SMILES Alt+Ctrl+P
InChI
MOL/CDXML Text Alt+Shift+Ctrl+P





SMILES

Acronimo di: **Simplified Molecular Input Line Entry System**

E' una breve stringa ASCII che descrive la struttura di una molecola.

SMILES canonico (Canonical SMILES)

SMILES Isomerico (Isomeric SMILES) include le regole per specificare gli isomeri, la chiralità e le configurazioni del doppio legame, ad es.

F/C=C/F rappresenta il trans-difluoroetilene

F/C=C\F rappresenta il cis-difluoroetilene

Infine, SMARTS è una variante di SMILES per poter includere atomi e legami "jolly" (variabili). Questa funzione è molto usata negli algoritmi per la ricerca nei database di composti chimici e loro dati.

SMILES – Wikipedia



UNIVERSITÀ
DEGLI STUDI DI TRIESTE

← → ↻ 🏠 🔒 https://it.wikipedia.org/wiki/Morfi 67% ⋮ 📄 ⌂ 🌐

Morfina

Da Wikipedia, l'enciclopedia libera.

Disambiguazione – Se stai cercando il racconto di Bulgakov, vedi **Morfina (racconto)**.

Le informazioni riportate non sono consigli medici e potrebbero non essere accurate. I contenuti hanno solo fine illustrativo e non sostituiscono il parere medico: leggi le avvertenze.

Alcuni dei contenuti riportati potrebbero generare situazioni di pericolo o danni. Le informazioni hanno solo fine illustrativo, non esortativo né didattico. L'uso di Wikipedia è a proprio rischio: leggi le avvertenze.

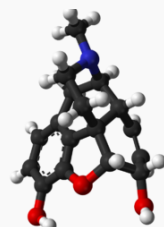
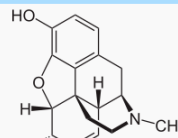
La **morfina** è il più abbondante e principale alcaloide contenuto nell'oppio, estratto dalla linfa essiccata fuoriuscita dal profondo taglio effettuato sulle capsule immature prodotte dal papavero da oppio (*Papaver somniferum*). La morfina è stato il primo principio attivo estratto da una fonte vegetale ed è uno degli almeno 50 alcaloidi di diversi tipi presenti nell'oppio. La morfina è generalmente contenuta in un 8-17 per cento del peso a secco dell'oppio, anche se può raggiungere il 26 per cento in alcune specie. La varietà dei papaveri come Przemko e Norman sono utilizzati per produrre due altri alcaloidi, **tebaina** e **papaverina**, utilizzati nella sintesi di oppioidi come **ossicodone** e **etorfina** e altre sostanze semi sintetiche. Il *Papaver bracteatum* (Lindley) è una specie da cui si ottiene molta tebaina. La presenza di morfina in altri papaverales e Papaveraceae, così come in alcune specie di lupulo e albero non è stata confermata. La morfina è prodotta in modo predominante nelle prime fasi del ciclo di vita della pianta. Passato il punto ottimale di estrazione, si arriva ai vari processi nello stabilimento di produzione di **codeina**, **tebaina**, **ossicodone**, quantità trascurabili di **idromorfone**, **didromorfina**, **didrocodaina**, **tetraidrotebaina** e **idrocodone**.

Viene utilizzata in medicina come **analgesico** per il trattamento del **dolore** acuto e cronico. Agisce rapidamente se somministrata in via endovenosa (EV) o sottocutanea (SC). Per via orale (OS), in forma di sciroppo o compresse, invece si deve attendere un arco di 20-60 minuti prima di sentire l'effetto analgesico. La morfina instaura rapidamente una fase di **assuefazione** e **toleranza**, ovvero la necessità di aumentarne le dosi per poter risentire l'effetto analgesico ottenuto precedentemente con minori dosaggi. Oltre a questo problema si instaura anche una dipendenza sia fisica che psicologica da questa sostanza, fatto sgradevole che può verificarsi dopo alcune settimane di uso giornaliero standard. È necessario scalare gradatamente il dosaggio senza interrompere bruscamente la terapia per non incorrere in una **sindrome di astinenza**.

Indice [nascondi]

- Usi medici
 - Trattamento del dolore
 - Dispnea
 - Disturbi associati all'assunzione di oppiacei
- Effetti indotti
- Effetti avversi
 - Costipazione
 - Squilibri ormonali
 - Effetti sulle capacità sensoriali e motorie
- Sindrome d'astinenza
- Tossicità
 - Intossicazione acuta (overdose)
 - Intossicazione cronica
 - Terapia delle intossicazioni acute e croniche
- Avvertenze
- Farmacologia
 - Farmacodinamica

Morfina



Nome IUPAC

(5α,6α)-7,8-dideidro-4,5-epossi-17-metilmorfina-3,6-diolo

Caratteristiche generali

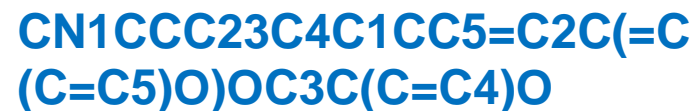
Formula bruta o **molecolare** C₁₇H₁₉NO₃
Massa molecolare (u) 285,342 g/mol
Numero CAS 57-27-2 ⓘ
Numero EINECS 200-320-2
Codice ATC N02AA01
PubChem 5288826 CID 5288826

DrugBank DB00295 ⓘ

SMILES CN1CCC23C4C1CC5=C2C(=C(C=C5)O)OC3C(C=C4)O

Proprietà chimico-fisiche

Costante di 8,2



ChemDraw Prime

File Edit View Object Structure Text Curves Colors Search Window Help

Undo Move Ctrl+Z
Redo not available Shift+Ctrl+Z
Cut Ctrl+X
Copy Ctrl+C
Paste Ctrl+V
Clear Del
Select All Ctrl+A
Invert Selection Shift+Ctrl+I
Repeat Move Ctrl+Y
Copy As >
Paste Special > SMILES Alt+Ctrl+P
InChI
MOL/CDXML Text Alt+Shift+Ctrl+P
Object

100%
B I U CH₂ X₂ X₂
A→A

Chemical structure of Morphine

SMILES – PubChem



COMPOUND SUMMARY

Morphine

Share Tweet Email

Cite Download

CONTENTS

- Title and Summary
- 1 Structures
- 2 Names and Identifiers
- 3 Chemical and Physical Properties
- 4 Spectral Information
- 5 Related Records
- 6 Chemical Vendors
- 7 Drug and Medication Information

PubChem CID: 5288826

Structure:



[Find Similar Structures](#)



SMILES – PubChem



PubChem Morphine (Compound)

2 Names and Identifiers

2.1 Computed Descriptors

2.1.1 IUPAC Name

(4*R*,4*aR*,7*S*,7*aR*,12*bS*)-3-methyl-2,4,4*a*,7,7*a*,13-hexahydro-1*H*-4,12-methanobenzofuro[3,2-*e*]isoquinoline-7,9-diol

Computed by LexiChem 2.6.6 (PubChem release 2019.06.18)

2.1.2 InChI

InChI=1S/C17H19NO3/c1-18-7-6-17-10-3-5-13(20)16(17)21-15-12(19)4-2-9(14(15)17)8-11(10)18/h2-5,10-11,13,16,19-20H,6-8H2,1H3/t10-,11+,13-,16-,17-/m0/s1

Computed by InChI 1.0.5 (PubChem release 2019.06.18)

2.1.3 InChI Key

BQJCRHHNABKAKU-KBQPJGBKSA-N

Computed by InChI 1.0.5 (PubChem release 2019.06.18)

2.1.4 Canonical SMILES

CN1CCC23C4C1CC5=C2C(=C(C=C5)O)OC3C(C=C4)O

Computed by OEChem 2.1.5 (PubChem release 2019.06.18)

2.1.5 Isomeric SMILES

CN1CC[C@]23[C@@H]4[C@H]1CC5=C2C(=C(C=C5)O)O[C@H]3[C@H](C=C4)O

Computed by OEChem 2.1.5 (PubChem release 2019.06.18)

Share Tweet Email

Cite Download

CONTENTS

Title and Summary

1 Structures

2 Names and Identifiers

3 Chemical and Physical Properties

4 Spectral Information

5 Related Records

6 Chemical Vendors

7 Drug and Medication Information

8 Pharmacology and Biochemistry

9 Use and Manufacturing

10 Identification

11 Safety and Hazards

12 Toxicity