



Ο Κώστας είναι ιδρυτικό μέλος του GREEKLUG.

Χημεία στο Linux (Μέρος 1ο)

Επισκόπηση των διαθέσιμων προγραμμάτων ελεύθερου λογισμικού για την επιστήμη της Χημείας.



Για smartphones

Εργαλεία: Python

Δυσκολία: ★★☆☆☆

URL: <http://bkchem.zirael.org>

Σε αυτό το άρθρο ξεκινάμε έναν κύκλο παρουσίασης χρήσιμων προγραμμάτων ελεύθερου λογισμικού για τη μελέτη της επιστήμης της Χημείας. Για έναν χημικό είναι πολύ σημαντικό να χρησιμοποιεί εργαλεία ελεύθερου λογισμικού, τα οποία είναι διαθέσιμα δωρεάν, με αποτέλεσμα την εξοικονόμηση χρημάτων για το σημαντικότερο και ακριβότερο κομμάτι αυτής της επιστήμης, το εργαστήριο.

Θα ξεκινήσουμε με την παρουσίαση ενός βασικού προγράμματος, το οποίο μπορεί να χρησιμοποιηθεί από μαθητές γυμνασίου έως καθηγητές πανεπιστημίου. Είναι το πρόγραμμα σχεδίασης χημικών (μοριακών και συντακτικών) τύπων στον υπολογιστή, BKchem. Αυτό είναι κάτι απαραίτητο, αν επιθυμεί ο μελετητής να δημιουργήσει μία σχολική ή μία επιστημονική εργασία στον υπολογιστή με σωστή αναπαράσταση των χημικών ενώσεων και όχι «με το χέρι», κάτι που θα υποβάθμιζε την αξία της εργασίας. Στο δεύτερο μέρος του άρθρου θα εισέλθουμε σε μία παρουσίαση ενός από τα προγράμματα του χημικού πακέτου Gnome Chemistry Utils (μπορεί να βρεθεί ως gcu σε διάφορα αποθετήρια λογισμικού).

BKchem

Το BKchem είναι γραμμένο στη γλώσσα προγραμματισμού Python, κάτι που το κάνει συμβατό και εκτελέσιμο με όλα τα λειτουργικά συστήματα. Επίσης, είναι μεταφρασμένο σε οκτώ γλώσσες, Γαλλικά, Αγγλικά, Ισπανικά, Τσεχικά, Παραδοσιακά Κινεζικά, Γερμανικά, Ιταλικά και Πολωνικά. Ο βασικός σκοπός του είναι η σχεδίαση των συντακτικών τύπων, καθώς οι μοριακοί πολλές φορές μπορούν να γραφούν σε ένα εξελιγμένο κειμενογράφο με διαθέσιμες τις επιλογές εκθέτη και δείκτη. Αλλά και πάλι αυτό δεν είναι αρκετό, όταν, π.χ., θέλουμε να γράψουμε σωστά το μαζικό και τον ατομικό αριθμό, όταν συμβολίζουμε ένα χημικό στοιχείο. Έτσι, λοιπόν, για να κάνουμε κάτι τέτοιο, χωρίς να χρειαζόμαστε, π.χ., το πακέτο math στο libreoffice, απλώς εισάγουμε στη γραμμή εντολών του BKchem, αφού πατήσουμε το tab ab:

```
<sup>12</sup><sub>6</sub> C
```

και έχουμε έτοιμο το συμβολισμό για τον άνθρακα. Με αυτόν τον τρόπο, μπορούμε να ξεχωρίσουμε δύο βασικές εργασίες: Τη συγγραφή μίας εργασίας και την παραγωγή των χημικών τύπων και των εικόνων, διατηρώντας την ψυχραιμία που απαιτείται κατά τη δημιουργία ενός τέτοιου άρθρου. Μια και αναφερθήκαμε στις εικόνες, να πούμε ότι ο τρόπος με τον οποίο μπορούμε να εισαγάγουμε αυτά που σχεδιάσαμε σε ένα κείμενο, είναι να κάνουμε εξαγωγή σε αρχείο .svg ή .png. Βέβαια, έχουμε περισσότερες επιλογές για εξαγωγή όπως .pdf, .ps και άλλα, όμως, συνήθως αυτά χρησιμοποιούνται όταν έχουμε μεγάλες δομές που πιάνουν ολόκληρη σελίδα.

Μπαίνοντας στο «ζουμί» της υπόθεσης του BKchem, έχω δημιουργήσει μία εικόνα (εικόνα 1), όπου μπορεί κάποιος να δει τις επιλογές που μας δίνονται, πατώντας τα αντίστοιχα tabs της εργαλειοθήκης. Έτσι, πατώντας:



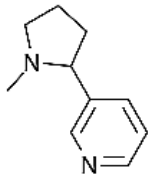
1 Αυτές είναι οι διαθέσιμες επιλογές στο BKchem και είναι αρκετές για την επιτυχή ολοκλήρωση των τύπων και των αντιδράσεων μίας επιστημονικής εργασίας.

- **το δεύτερο tab** (με την πλάγια γραμμή), μπορούμε να δούμε πώς είναι διαθέσιμοι όλοι οι τύποι και προσανατολισμοί των χημικών δεσμών
- **το τρίτο** (με το κυκλωεξάνιο), μας εμφανίζονται οι κυκλικόι τύποι, όπως το βενζόλιο, το κυκλοπενταδιένιο και μερικά ετεροκυκλικά templates, του O, του S και του N
- **το τέταρτο tab**, μπορούμε εμείς να δημιουργήσουμε κάποιο template
- **το έκτο tab** (με το θετικό πρόσημο) μάς δίνεται η δυνατότητα της τοποθέτησης ηλεκτρονίων σε ρίζες ή δομές Lewis, καθώς και θετικών ή αρνητικών φορτίων
- **το έβδομο tab**, μας δίνονται τα απαραίτητα βέλη για την αναπαράσταση των χημικών αντιδράσεων
- **τα τέσσερα τελευταία**, εμφανίζονται οι διάφοροι τρόποι περιστροφής και παραμόρφωσης, μερικά βοηθητικά σχήματα και η αρίθμηση των δεσμών καθώς και ο συμβολισμός της διάσπασής τους αντιστοίχως

Επίσης, το BKchem δέχεται αρχεία του τύπου .cml, και .mol, .sd, .sdf, τα οποία χρησιμοποιούνται ευρύτατα μεταξύ των χημικών προγραμμάτων. Μερικά ακόμη χρήσιμα εργαλεία που απευθύνονται κυρίως στους μαθητές και στους φοιτητές είναι η επιλογή Check Chemistry στο μενού Chemistry, η οποία επιβεβαιώνει αν η ένωση που φτιάξαμε, μπορεί θεωρητικά να υπάρχει ή έχουμε κάνει κάποιο λάθος όσον αφορά στο πλήθος των δεσμών ή στον αριθμό των ατόμων. Κάτι ακόμη που μπορεί να βοηθήσει όποιον δυσκολεύεται στα πρώτα βήματά του στη Χημεία, είναι η επιλογή Compute oxidation number, η οποία μας πληροφορεί για τον αριθμό οξειδωσης κάθε στοιχείου μέσα στην ένωση.

Για πιο geek καταστάσεις, έχουμε τη δυνατότητα να εισαγάγουμε ή να παραγάγουμε για μία ένωση την έκφραση SMILES (simplified molecular input line entry specification), η οποία είναι μία γραμμή με στοιχεία και αριθμούς με σκοπό την αναπαράσταση μορίων με στοιχεία ASCII. Για παράδειγμα, η νικοτίνη της οποίας η δομή αναπαρίσταται στη δεύτερη εικόνα, έχει έκφραση SMILES (εικόνα 2):

```
CN1CCCC[C@H]1c2cccnc2
```



SMILES CN1CCC[C@H]1c2cccnc2

2 Ο συντακτικός τύπος της νικοτίνης, όπως μπορεί να απεικονιστεί στο BKchem.

Ένας άλλος τρόπος να εισάγουμε απευθείας μία ένωση στο BKchem ώστε να μη μπαίνουμε στον κόπο να τη σχεδιάζουμε, είναι να γνωρίζουμε τη διεθνή έκφρασή της, InChI IUPAC International Chemical Identifier. Η έκφραση αυτή σχεδιάστηκε από την IUPAC και το NIST μεταξύ 2000 και 2005, ενώ το format και οι αλγόριθμοί της είναι ελεύθερο λογισμικό υπό την άδεια LGPL. Έτσι, λοιπόν, για να παραστήσουμε την αιθανόλη, επιλέγουμε από το μενού Chemistry, Read InChI, και εισάγουμε την έκφραση:

1S/C2H6O/c1-2-3/h3H,2H2,1H3

Καλά όλα αυτά τα τελευταία, αλλά πού θα βρούμε τις εκφράσεις InChI; Την απάντηση μας δίνει το Εθνικό Ινστιτούτο Προτύπων και Τεχνολογίας των ΗΠΑ, το οποίο τελεί υπό την αιγίδα του Υπουργείου Εμπορίου των ΗΠΑ και διατηρεί τη διαδικτυακή βιβλιο της Χημείας, το NIST Webbook, στη διεύθυνση <http://webbook.nist.gov/chemistry/>, όπου δίνονται πληροφορίες για εκατοντάδες χιλιάδες χημικές ενώσεις. Όσον αφορά στις εκφράσεις SMILES, γι' αυτές υπάρχει μία αρκετά εύκολη μεθοδολογία εύρεσής τους, ενώ έχουν και το δικό τους τύπο αρχείου .smi.

GChemTable

Το πρώτο πρόγραμμα που θα εξετάσουμε από το πακέτο Gnome Chemistry Utils, είναι, φυσικά, το πιο βασικό εργαλείο ενός χημικού, ο πίνακας της περιοδικότητας των στοιχείων ή αλλιώς περιοδικός πίνακας, GChemTable. Προτού αναλύσω τη λειτουργία του, πρέπει να πω ότι είμαι σε θέση να το κάνω, επειδή ακριβώς το συγκεκριμένο πρόγραμμα είναι κάτι παραπάνω από έναν περιοδικό πίνακα με προβολή των στοιχείων και μερικών πληροφοριών γι' αυτά. Αυτή τη δουλειά την κάνει το εξαιρετικά ελαφρύ GPeriodic, το οποίο είναι μεμονωμένο πρόγραμμα και δεν συμπεριλαμβάνεται στο πακέτο gcu.

Στο GChemTable τώρα, αυτό που μπορούμε να δούμε με την πρώτη ματιά, είναι τα χημικά στοιχεία με διάφορα χρώματα και αποχρώσεις ανάλογα με τις ιδιότητές τους. Για παράδειγμα, μπορούμε να δούμε τα αλκαλιμέταλλα με μοβ χρώμα, το οποίο σκουραίνει με την αύξηση της σχετικής ατομικής μάζας (ατομικού βάρους). Αντίστοιχα, το μοναδικό στο είδος του υδρογόνο θα το δούμε με λευκό χρώμα, όπως και παρόμοια στοιχεία τα οποία δύσκολα θα σχετιστούν με τα γειτονικά τους, καθώς αποτελούν ξεχωριστές περιπτώσεις.

Πατώντας πάνω σε ένα στοιχείο, ανοίγει ένα παράθυρο, όπου μας παρουσιάζονται αναλυτικώς όλες οι ιδιότητες, αλλά και σχετικοί πίνακες των ιδιοτήτων του στοιχείου, σε τέσσερις καρτέλες (εικόνα 3):

- **Main:** Δίνεται η ονομασία του στοιχείου σε οκτώ γλώσσες, η σχετική ατομική μάζα και η ηλεκτρονική διαμόρφωση του στοιχείου



3 Η καρτέλα ιδιοτήτων στο πρόγραμμα GchemTable.

- **Electronic properties:** Οι ηλεκτρονικές ιδιότητες του στοιχείου, όπως η ηλεκτραρνητικότητα και η ενέργεια ιονισμού μαζί με τη σχετικές συγκριτικές καμπύλες
- **Radii:** Οι διάφορες ακτίνες του ατόμου
- **Thermodynamics:** Σημεία τήξεως και βρασμού, καθώς και οι σχετικές συγκριτικές καμπύλες

Επανερχόμενοι στον πίνακα, μέσω του μενού View → Color Scheme μπορούμε να αλλάξουμε την ιδιότητα με βάση την οποία θα χρωματίζεται ο περιοδικός πίνακας. Βλέπουμε, λοιπόν, ότι όσο πιο πολύ έχουν κάποια στοιχεία μία συγκεκριμένη ιδιότητα, τόσο πλησιάζουν προς το μαύρο χρώμα.

Οι διαθέσιμες επιλογές είναι No Colors, Default, Physical States, η οποία μας δείχνει, ανάλογα με τη θερμοκρασία, ποια είναι η κατάσταση (στερεή, υγρή, αέρια) των διαφόρων στοιχείων, Family, η οποία μας παρουσιάζει τα στοιχεία σε οικογένειες (αλκαλιμέταλλα, μέταλλα, ευγενή αέρια κ.λπ.), Electronegativity, δηλαδή, η ηλεκτραρνητικότητα, Atomic Radius, δηλαδή, η ακτίνα, καθώς και η πολύ χρήσιμη επιλογή Block, που ταξινομεί τα στοιχεία ανάλογα με την ηλεκτρονική διαμόρφωσή τους!

Για πιο geek καταστάσεις, έχουμε τη δυνατότητα να εισαγάγουμε ή παραγάγουμε για μία ένωση την έκφραση SMILES, που χρησιμοποιεί σύμβολα ASCII.

Τέλος, στο μενού View → Element Charts μπορούμε να δούμε όλα τα είδη των συγκριτικών καμπύλων που συναντούμε στις ιδιότητες των στοιχείων μαζεμένα και ίσως μερικά παραπάνω. Το χρήσιμο εργαλείο σε αυτή την περίπτωση είναι το –όχι πάντα αυτονόητο– resizing, στο οποίο μπορεί να υποβληθεί το παράθυρο της καμπύλης.

Επίλογος

Στο επόμενο τεύχος του «Linux Inside» θα συνεχίσουμε στα επόμενα εργαλεία του πακέτου gcu, chemical calculator, spectrum viewer και gnome crystal, για τον υπολογισμό μοριακών βαρών και την προβολή φασμάτων και κρυσταλλικών δομών αντίστοιχα. Μέχρι τότε, εύχομαι καλό ακαδημαϊκό έτος σε όλους τους συναδέλφους χημικούς και καλό φθινόπωρο!