

Wprowadzenie do programu ACD/ChemSketch

Program ChemSketch służy do rysowania wzorów strukturalnych, obliczania parametrów molekularnych i tworzenia najróżniejszych rysunków. Program ma następujące możliwości: W trybie STRUCTURE można rysować dowolne wzory strukturalne i obliczać właściwości cząsteczek.

W trybie DRAW można tworzyć dowolne rysunki.

Dodatkowo można także ze wzorów strukturalnych wyznaczać wzory cząsteczkowe i obliczać:

- Masę cząsteczkową (formula weight)
- Skład (composition)
- Refrakcję molową (molar refactivity)
- Objętość molową (molar volume)
- Parachorę — wielkość empiryczna wprowadzona w 1924 r. przez S. Sudgena, charakteryzująca budowę cząsteczkową substancji; dla jednego mola parachora

$$P = \frac{M\sigma^{\frac{1}{4}}}{d_c - d_p}$$

określona jest wzorem: $P = \frac{M\sigma^{\frac{1}{4}}}{d_c - d_p}$, gdzie M – masa cząsteczkowa substancji; σ – napięcie powierzchniowe; d_c – gęstość cieczy, d_p – gęstość pary. Parachora znajduje zastosowanie w analizie budowy cząsteczek; porównanie wartości parachory obliczonej ze wzoru strukturalnego z wynikiem pomiaru doświadczalnego pozwala rozstrzygnąć, czy wzór ten w istocie odpowiada rzeczywistej budowie danego związku.

- Współczynnik załamania światła (index of refraction)
- Napięcie powierzchniowe (surface tension)
- Gęstość (density)
- Polaryzowalność (polarizability)
- Masę monoizotopową (monoisotopic mass)
- Masę nominalną (nominal mass)
- Masę średnią (average mass)

Okno programu

Tryby pracy: Structure - Draw

Cofnij, ponów

Usuń

Szablony

3D Viewer

Przenoszenie, rotacja, rotacja 3D, selekcja

Rysowanie normalne, Rysowanie ciągłe, Rysowanie łańcuchów

Zmiana pozycji
Ustaw wiązanie poziomo
Ustaw wiązanie pionowo

Clean Structure
Wyczyść strukturę

Optymalizacja 3D

Układ okresowy pierwiastków

Edit Label
Edytuj etykietę

Tablica rodników

1-ChemSketch 2-Database 3-ChemCoder

Rysowanie prostych wzorów strukturalnych

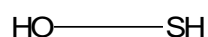
Proste związki nieorganiczne

Przystępując do rysowania wzorów strukturalnych, należy przełączyć program do trybu *Structure* i wybrać narzędzie *Draw Normal*.

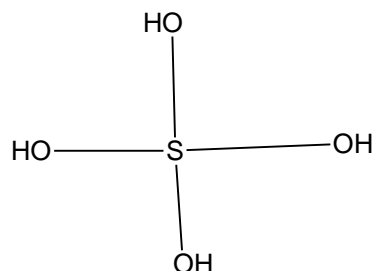
1. Na pasku atomów po lewej stronie wybierz tlen i kliknij na środku ekranu – pojawi się tam cząsteczka H₂O.
2. Następnie wybierz siarkę i kliknij obok wody – pojawi się H₂S:



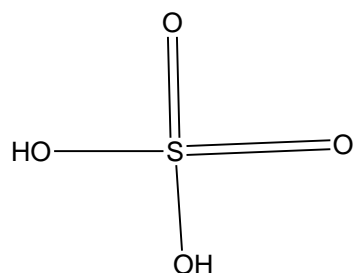
3. Połącz obie cząsteczki przeciągając myszką od jednej do drugiej. Otrzymasz:



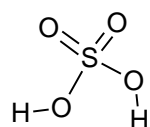
4. Wokół siarki umieść 3 kolejne cząsteczki wody i połącz je z atomem siarki:



5. Kliknij w dwa wybrane wiązania S-O:



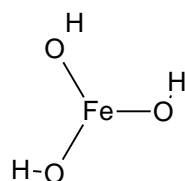
6. Na koniec kliknij przycisk *Clean* a potem *3D Optimization*. Otrzymasz ostatecznie cząsteczkę kwasu siarkowego:



7. Możesz teraz tę cząsteczkę obrócić, przesunąć lub powiększyć.

W podobny sposób narysuj cząsteczkę wodorotlenku żelaza(III):

1. Z układu okresowego wybierz atom Fe, umieść go na środku kartki – pojawi się tam jon Fe^{2+} .
2. Na dole paska atomów wybierz ikonę z czerwonym znakiem „+”. Kliknij ponownie atom żelaza zwiększając w ten sposób ładunek do 3+.
3. Teraz umieść trzy cząsteczki wody wokół jonu żelaza (wybierając atom tlenu) i połącz je z żelazem. Powstanie cząsteczka $\text{Fe}(\text{OH})_3$.
4. Na koniec zoptymalizuj strukturę jak w punkcie 6 powyżej. Otrzymasz:



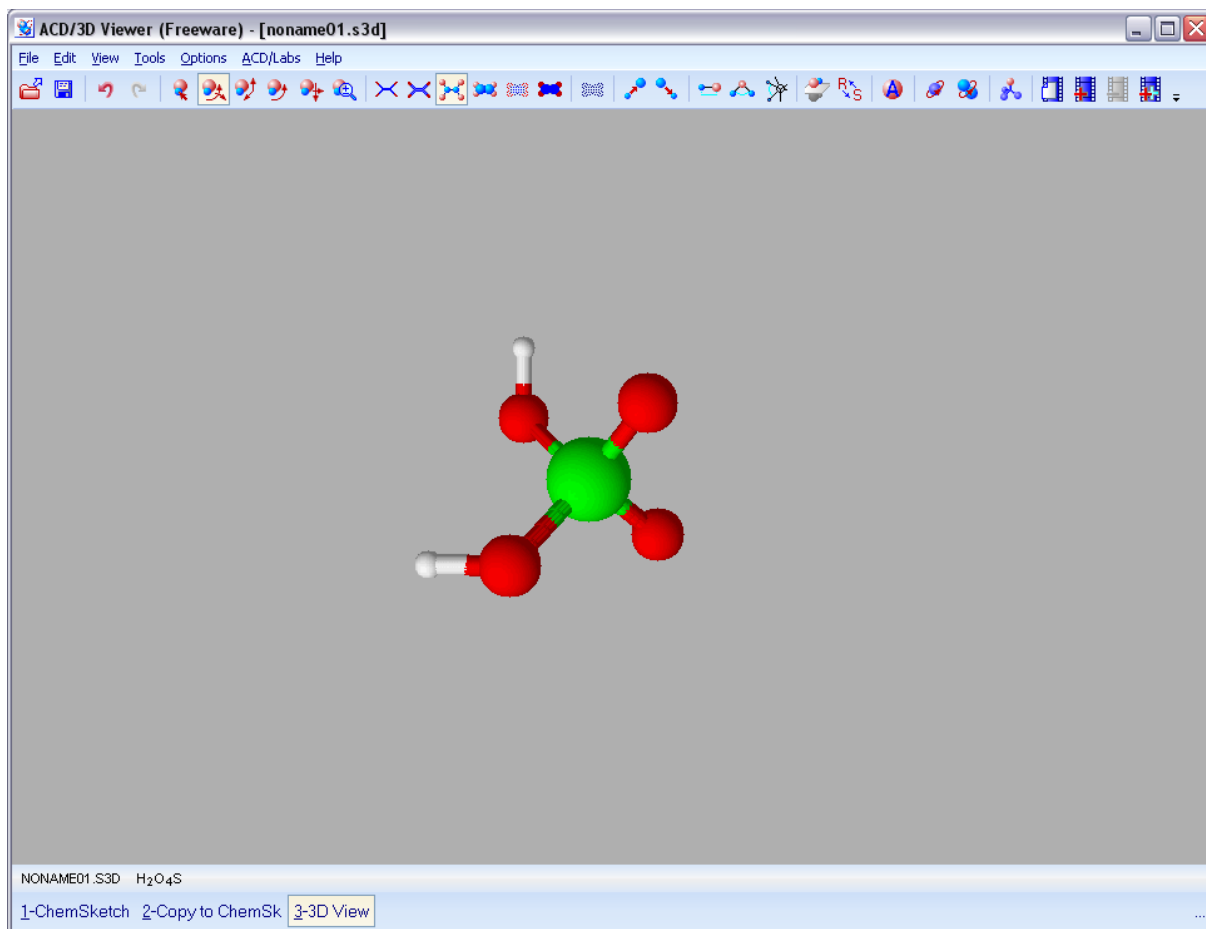
W podobny sposób spróbuj otrzymać wzory innych cząsteczek, np. H_2O , CO_2 , Al_2O_3 .

Każdą z cząsteczek możesz obejrzeć w *3D Viewerze*.

3D Viewer

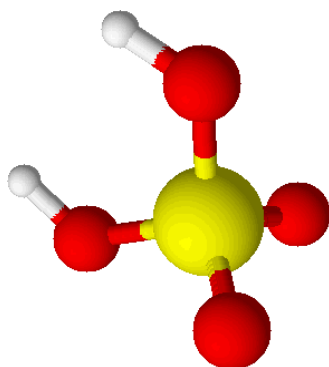
Program *ChemSketch* jest wzbogacony o przeglądarkę trójwymiarową *3D Viewer*.

Uruchamia się ją, rozwijając menu ACD / Labs. lub przyciskiem na górnym pasku narzędzi (patrz rysunek na stronie 3)



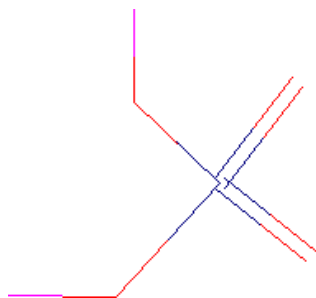
Jak widać *3D Viewer* posiada własny pasek narzędzi. Jest on bardzo intuicyjny i dobrze opisany. Poświęć kilka minut i poeksperymentuj klikając kolejne ikonki oraz czytając ich opisy, aby zapoznać się z możliwościami programu.

Dowolną cząsteczkę (po optymalizacji trójwymiarowej) wystarczy zaznaczyć i przełączyć się do *3D Viewera* aby otrzymać jej model, np. model H_2SO_4 z pierwszego ćwiczenia:

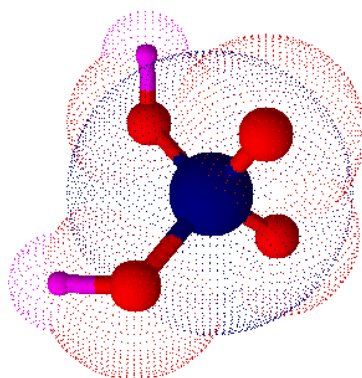


Model cząsteczki można wprawiać w ruch, używając myszki lub funkcji *Auto rotate*.

Jeśli interesuje cię krotność wiązań, wybierz widok *Wireframe* 

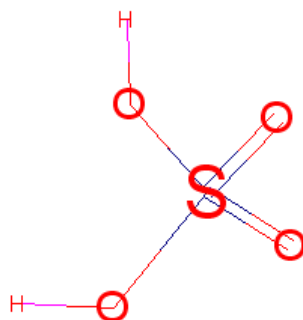


Można też zobaczyć promienie atomowe (pokazane linią przerywaną) włączając *With Dots*:




Kolor tła można zmieniać w menu *Options – Colors*.

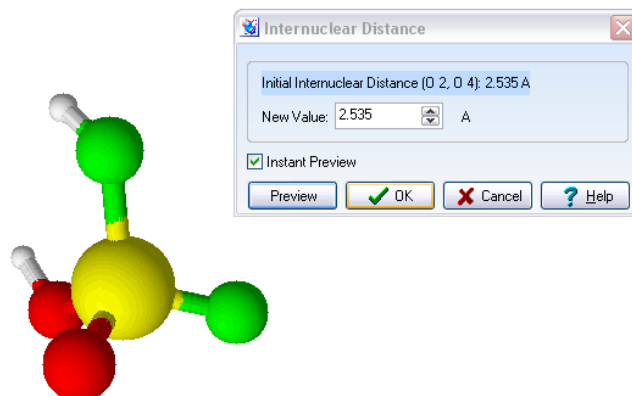
Aby wyświetlić symbole pierwiastków, z menu *View* wybierz *Label All*:



3D Viewer umożliwia także obliczenie długości konkretnych wiązań i kątów w cząsteczce.

Aby zmierzyć odległość między atomami tlenu w cząsteczce powyżej:

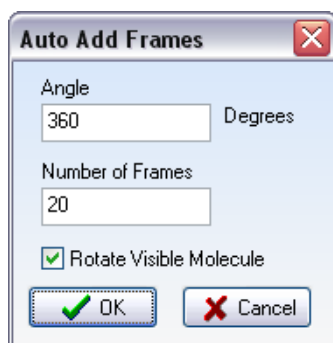
1. Przełącz się na widok *Balls and Sticks*
2. Kliknij przycisk *Bond Length* 
3. Wskaż myszką najpierw pierwszy, potem drugi atom. Otrzymasz:



W podobny sposób wskazując trzy atomy możesz wyznaczyć kąt między nimi.

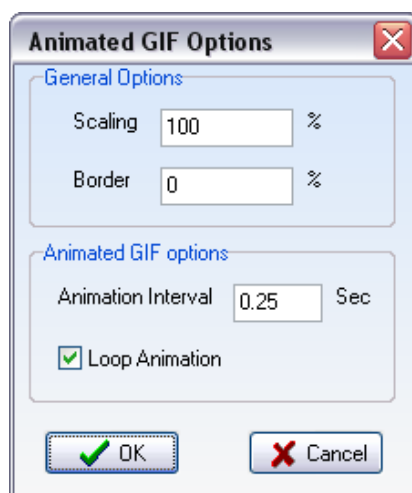
Cztery ostatnie ikonki na pasku narzędzi pozwalają stworzyć własny animowany GIF.

1. Zmieńmy najpierw kolor tła na białe (*Option – Colors*).
2. Kliknij ikonę *Auto Add Frames* na pasku narzędzi. Pojawi się okno:



3. Zmień ilość klatek (frames) na 24 i kliknij OK.
4. Zapisz wynik pracy jako animowany GIF.

W opcjach zapisu możesz ustalić dalsze szczegóły:

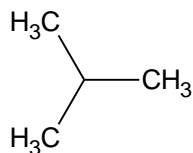


5. Na koniec zobacz podgląd stworzonego pliku.

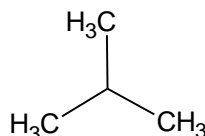
Poszczególne klatki do filmu możesz oczywiście dodawać też ręcznie.

Wzory strukturalne związków organicznych

Po upewnieniu się, że aktywne jest narzędzie *Draw Normal*, a wybranym atomem jest węgiel, kliknij na środku kartki wstawiając cząsteczkę CH₄. Teraz kliknij jeszcze 3x w centralny atom C uzyskując:

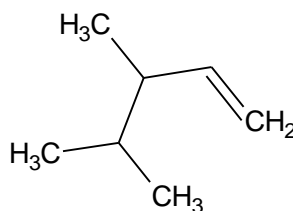
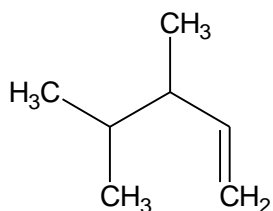


oraz po obrocie:

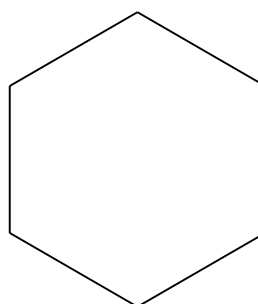
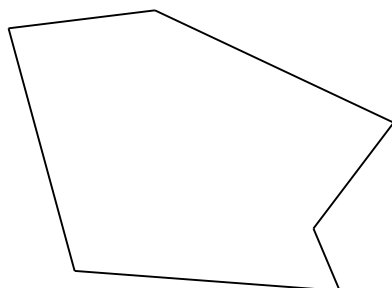


Przećwicz na tej prostej molekułe operacje typu ustawienia wiązań „(set Bond...” i „flip...” oraz zmiany wiązań na podwójne, potrójne i znów pojedyncze (wystarczy klikać myszką w odpowiednie wiązanie).

Potem dołącz kolejne grupy CH₃ i zmień jedno wiązanie na podwójne oraz dokonaj niewielkiego obrotu uzyskując kolejno:



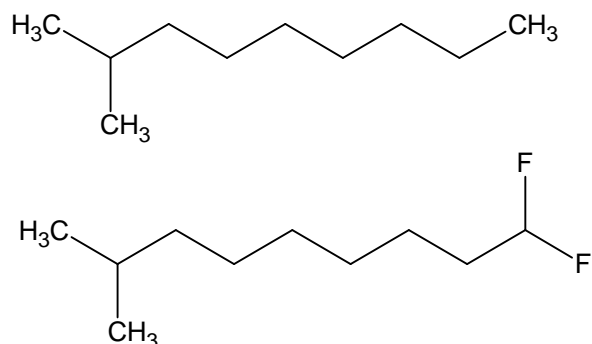
Poniżej przykład dosyć niechlujnie rysowanego cykloheksanu i działania operacji „Clean”, która standaryzuje długości wiązań i kąty, tak aby rysunek był możliwie poprawny z chemicznego punktu widzenia.



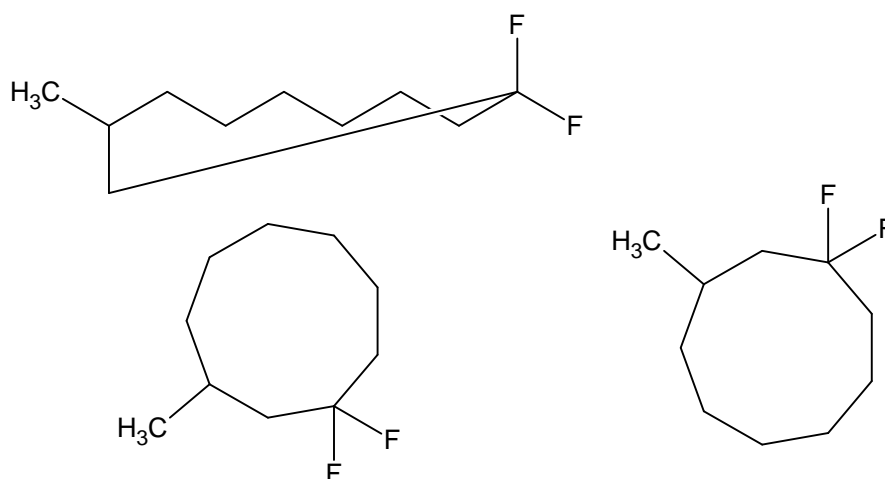
Przy okazji warto przećwiczyc działanie przycisków *Undo*, *Delete* itd.

Narzędzie *Draw Continuous* działa podobnie do *Draw Normal*, ale dodatkowo można dzięki niemu „wypuszczać” nowe atomy z wybranego miejsca.

Poniżej znajdują się dwa rysunki wykonane za pomocą narzędzia *Draw Continuous* — na drugim „wypuszczono” atomy fluoru (po uprzednim wybraniu go w tabeli pierwiastków):

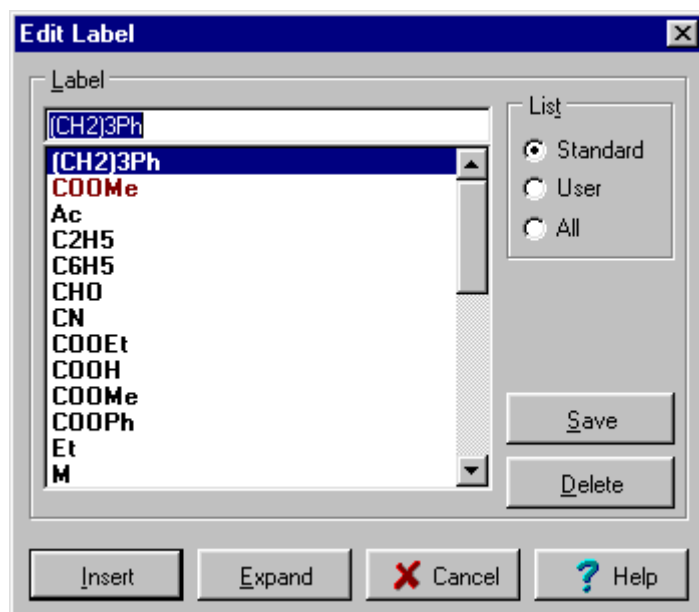


W obu trybach (*Normal* i *Continuous*) można myszką rysować wiązania, tak jak to zrobiono niżej. Drugą strukturę otrzymuje się po zastosowaniu przycisku „*Clean*”, a trzecią po „*Flip top to bottom*” (oczywiście po uprzednim zaznaczeniu)

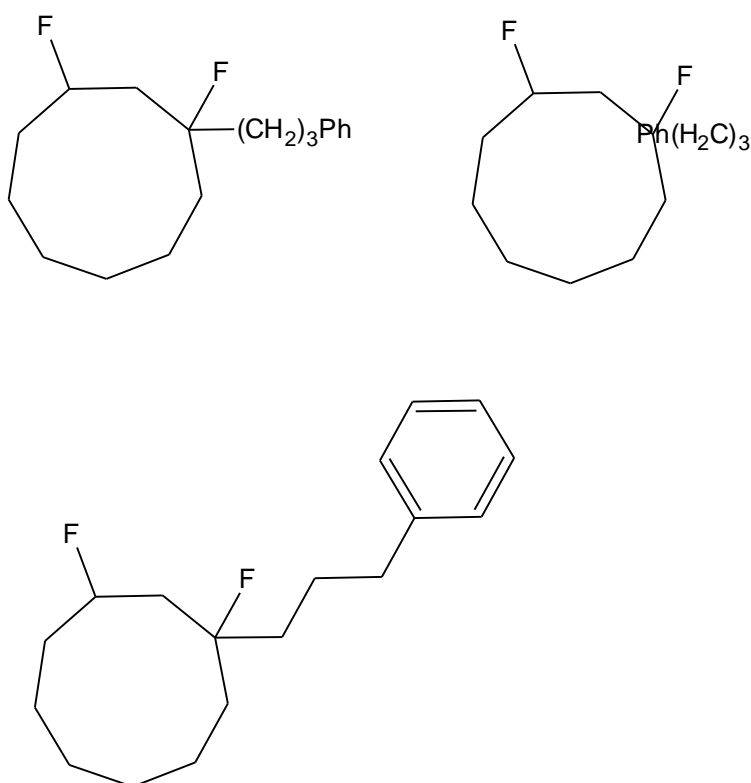


Następnie wykonaj następujące operacje:

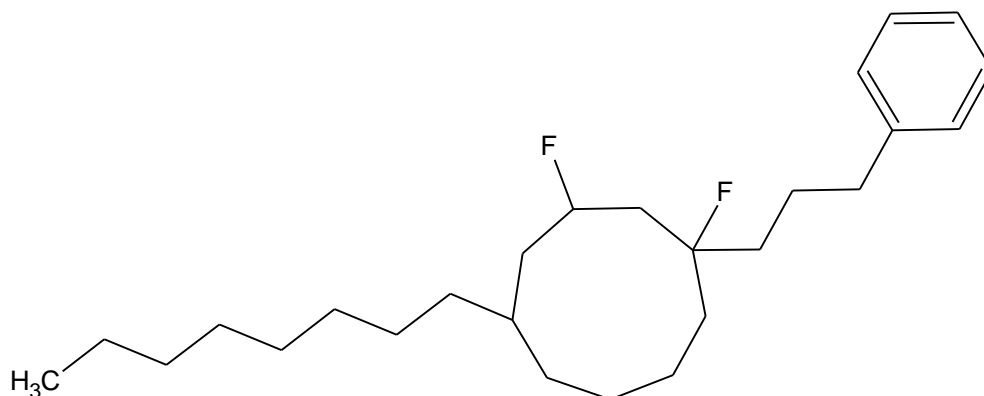
1. Ostatnią grupę CH_3 zastąp fluorem.
2. Jeden z fluorów zastąp skrótem, w którym jest między innymi grupa fenylowa (Ph).
Wstawianie tych skrótów umożliwia przycisk abc *Edit Atom Label*
(znajduje się on po lewej stronie pod przyciskami pierwiastków)
3. Po uaktywnieniu tego przycisku klikamy w jeden z atomów fluoru i zastępujemy go grupą wybraną z menu, lub wpisujemy wzór sami (w tym wypadku: $(\text{CH}_2)_3\text{Ph}$)



4. Przetwórz kolejność w zapisie skrótu, który widać na drugim z poniższych rysunków, otrzymano po zastosowaniu narzędzia *Change Position* (przycisk przed serią tych, które zmieniają ustawienia wiązań). Jeśli chcemy rozwinąć skrót, klikamy ponownie w grupę i naciskamy przycisk **Expand** (tak otrzymano trzeci z poniższych wzorów).

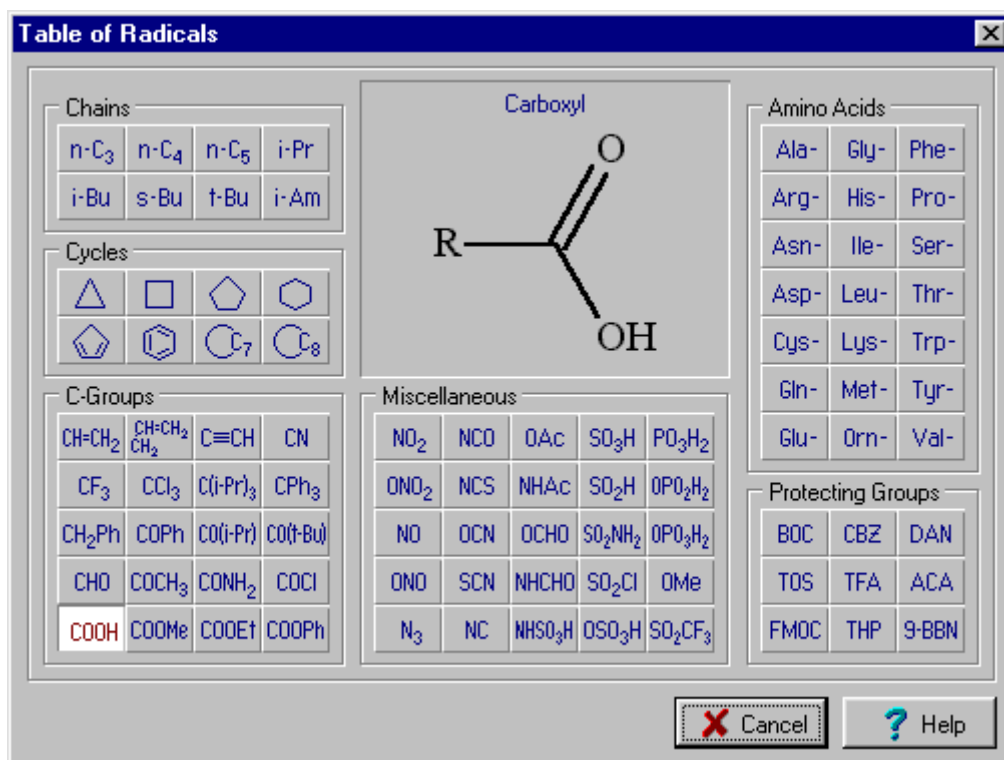


5. Łańcuch, który widać na poniższym rysunku został dorysowany przy użyciu przycisku „Draw Chains”.

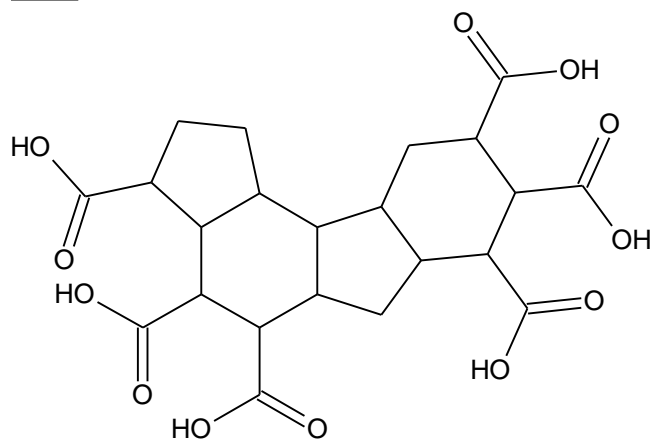
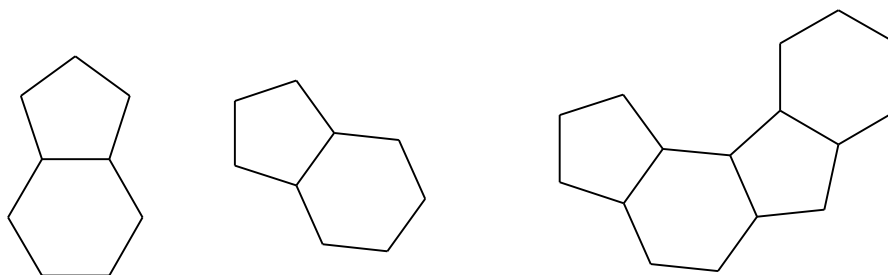


Używanie struktur pierścieniowych

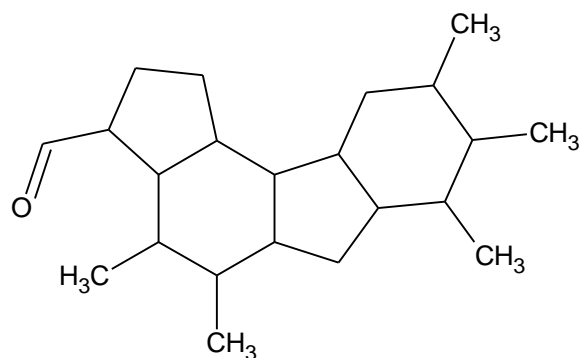
1. Z paska po prawej stronie ekranu wybierz *Tabelę rodników*:



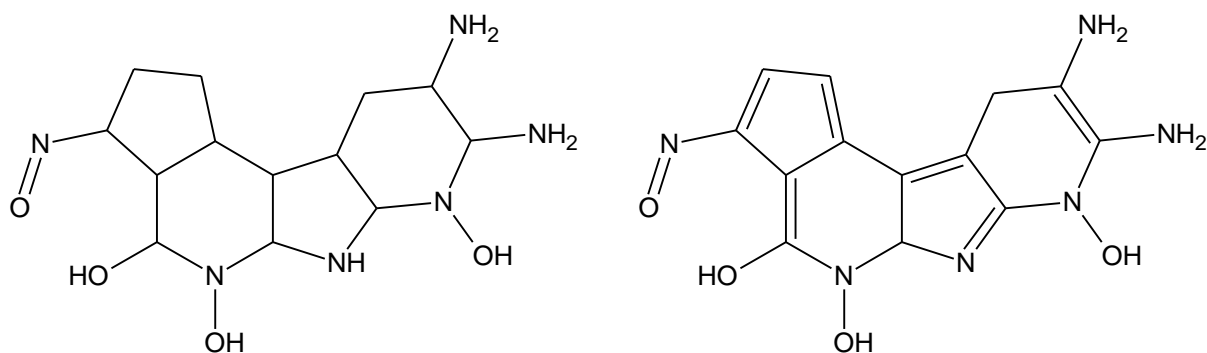
- Z tabeli tej wybierz najpierw cykloheksan, obróć go nieco w lewo i dołącz do niego cyklopentan (*Cykloheksan i cyklopentan z Tabeli Rodników tworzą pierwszy układ*).
- Obracamy go lekko i powtarzamy procedurę uzyskując 4 połączone pierścienie (rys 3).
- Do wybranych atomów dołączmy grupy karboksylowe otrzymując finalną cząsteczkę:



Na tej molekule można poćwiczyć usuwanie konkretnych atomów lub ich zamianę, np.:



Lub po zastąpieniu atomami azotu i tlenu:

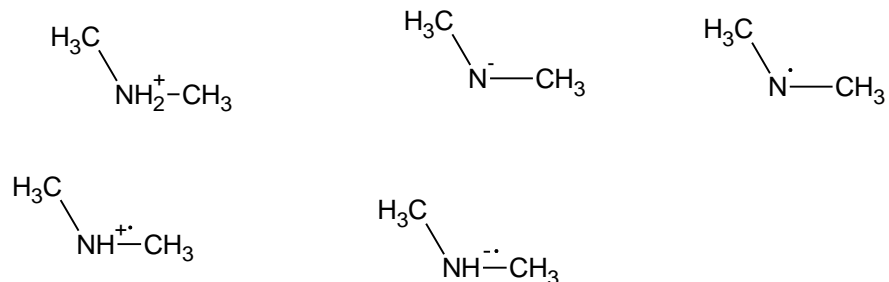


Przypomnijmy, że w każdym trybie rysowania można zmieniać typ wiązań (np. na podwójne) przez klikanie w wybrane wiązanie.

Definiowanie anionów i kationów

Służy do tego przycisk „+” po lewej stronie ekranu (pasek atomów). Należy nacisnąć na jego prawy dolny róg i wtedy rozwinie się pasek z kolejnymi ikonami. Wybierając poszczególne przyciski, dostaniemy: *kation, anion, wolny rodnik, dodatni jon rodnika, ujemny jon rodnika*.

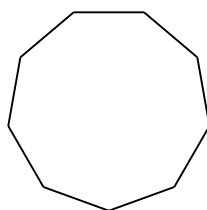
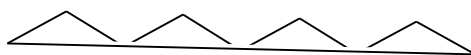
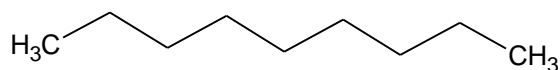
Przećwicz, uzyskując kolejno poniższe struktury:



Optymalizacja dwuwymiarowa:

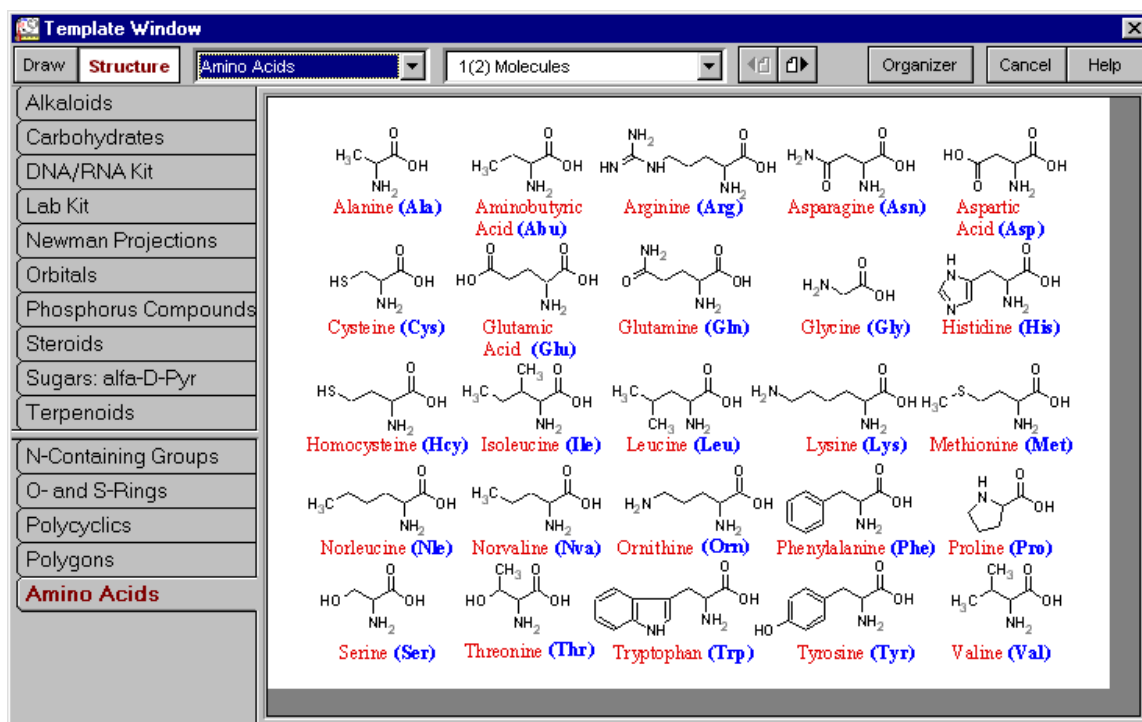
Operacja „Clean” może być uważana za optymalizację dwuwymiarową, gdyż jej zastosowanie prowadzi do ponownego narysowania cząsteczki i standaryzacji długości wiązań i kątów. Wykonaj przykładowe ćwiczenie:

Najpierw w trybie rysowania łańcuchów tworzymy pierwszą strukturę. Potem po przejściu do tryby normalnego łączymy ostatni atom z pierwszym, a na koniec stosujemy przycisk „Clean”

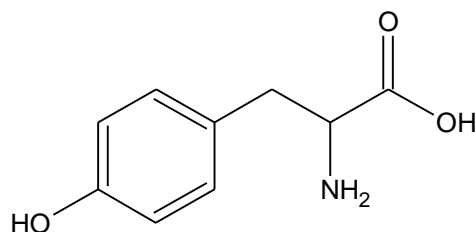


Tworzenie struktury cyklicznych peptydów.

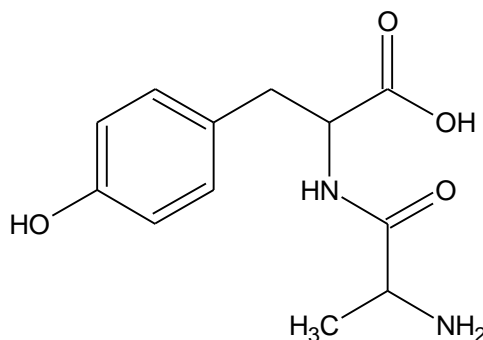
1. W oknie szablonów (*Template*) wybieramy aminokwasy, a z nich wzór tyrozyny (*Tyrosine*)



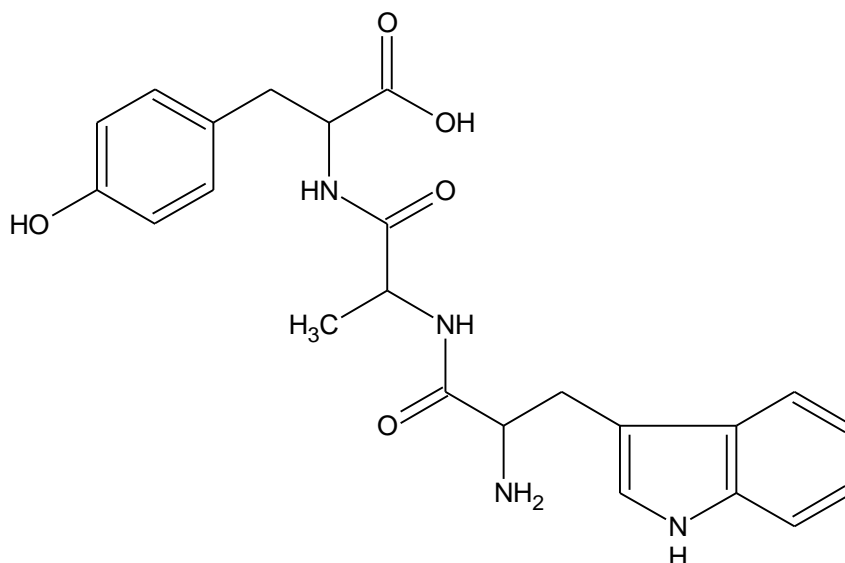
2. Klikamy na środku kartki:



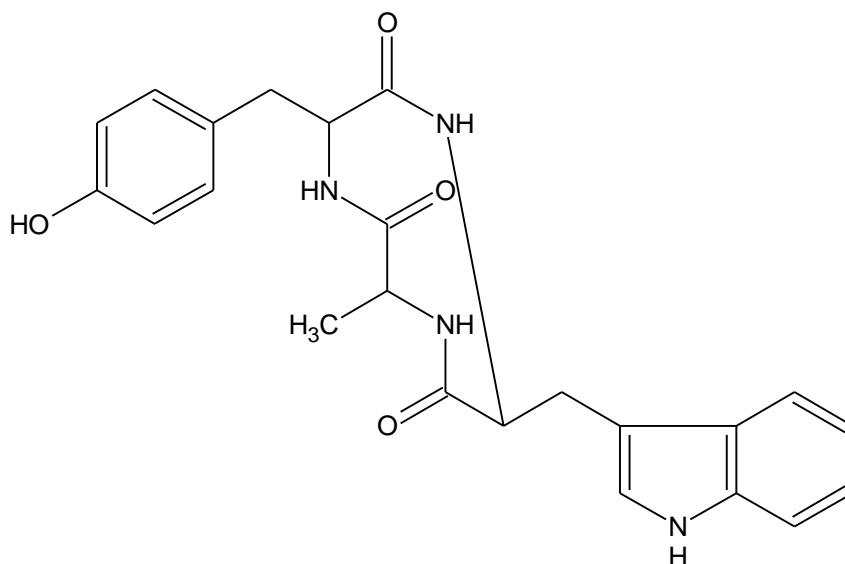
3. Z *tabeli rodników* (na prawym pasku narzędzi) wybieramy *Alaninę* (Ala-) i doczepiamy ją do grupy NH₂ tyrozyny



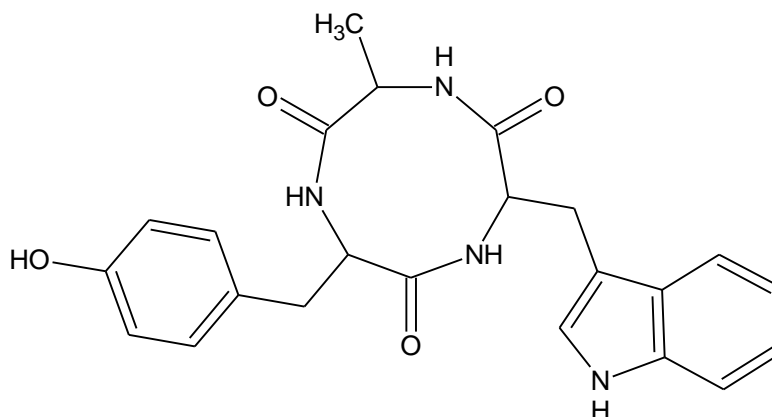
4. Z tabeli rodników wybieramy *Tryptofan* ((Trp-) i doczepiamy w miejsce grupy NH_2 .



5. Przechodzimy do trybu *Select / Move* i przeciągamy grupę NH_2 do grupy OH.



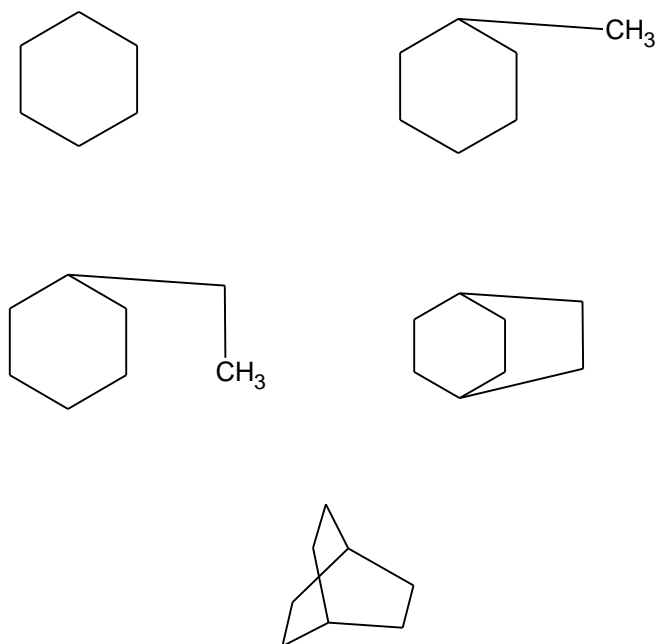
6. Teraz wystarczy zastosować operację *Clean.*, żeby otrzymać:



Optymalizacja trójwymiarowa

Program może dokonać optymalizacji w trzech wymiarach, obliczając wartości kątów i długości wiązań. Zróbmy to na przykładzie *dwucyklooktanu*.

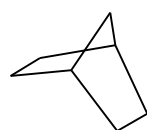
1. W menu *Options* wybieramy *Preferences* i przełączmy się do *Structure*. Tam wyłączmy *Add Hydrogens* i naciskamy *OK*.
2. Z tabeli rodników kopiujemy cykloheksan.
3. W trybie rysowania normalnego tworzymy most wodorowęglowy, tak jak to pokazano na kolejnych rysunkach poniżej.
4. Wybieramy optymalizację 3D.



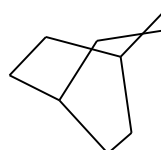
bicyclo[2.2.2]octane

Po wykonaniu optymalizacji trójwymiarowej wykorzystano możliwość generowania nazwy ze wzoru strukturalnego (w wersji darmowej programu opcja ta działa dla cząsteczek mających mniej niż 50 atomów). Chcąc to zrobić, należy zaznaczyć wybraną cząsteczkę, a następnie rozwinąć menu *Tools*, wybrać pozycję *Generale* i tam: *Name from Structure*.

Zadanie dodatkowe: Narysuj w analogiczny sposób i nazwij następujące struktury:



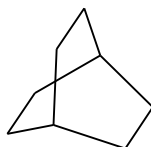
bicyclo[2.2.1]heptane



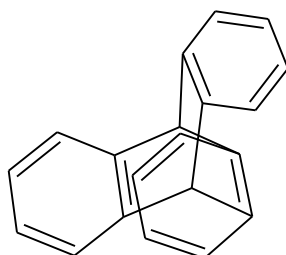
bicyclo[3.2.2]nonane

Rozbudujmy teraz dwucyklooktan o benzeny.

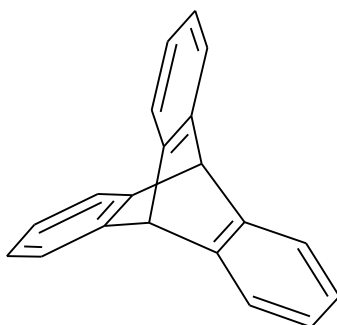
1. Rysujemy strukturę tak jak poprzednio lub pobieramy ją z okna *Szablonów (Template / Bicyclics)*



2. Z tabeli rodników wybieramy benzen i przyłączmy go do odpowiednich wiązań. Otrzymujemy dosyć koślawą strukturę:

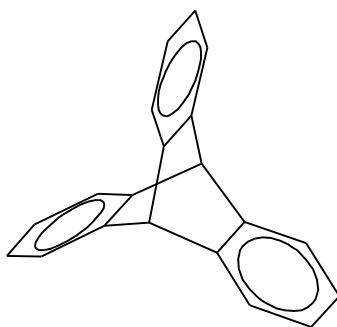


3. Jednak po zastosowaniu optymalizacji 3D uzyskuje ona postać:

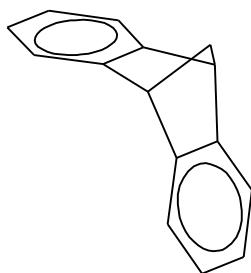


Uwaga: Czasem optymalizacja trójwymiarowa nie może być wykonana, gdyż wyjściowa struktura jest zbyt „pokręcona”. Należy wówczas najpierw zastosować operację Clean, a potem jeszcze raz spróbować zoptymalizować strukturę w trzech wymiarach.

4. Po włączeniu w *Tools* opcji *Show Automatically*, otrzymamy:

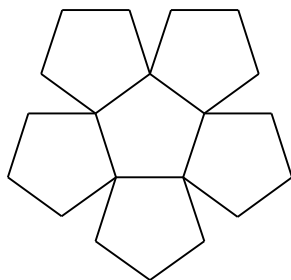
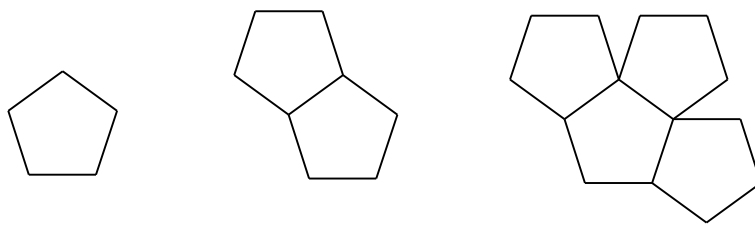


Zadanie dodatkowe: Narysować strukturę podaną poniżej.



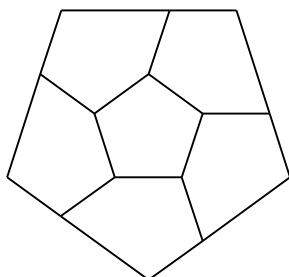
Tworzenie struktury dodekahedranu

1. Najpierw z cyklopentanów tworzymy to, co poniżej.

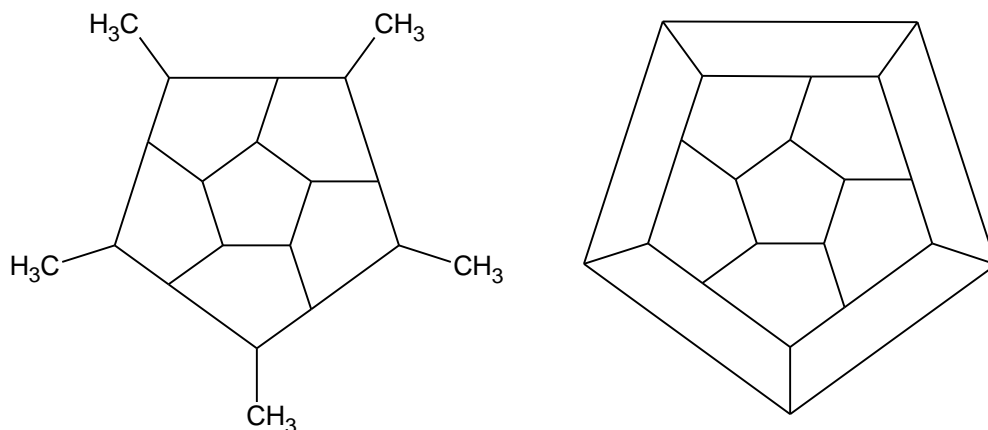


2. Następnie uruchamiamy tryb *Select/Move* i ciągniemy odpowiednie atomy do sąsiednich.

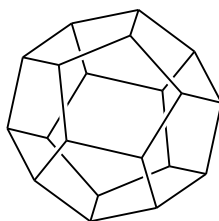
Otrzymujemy coś takiego:



3. Do atomów tworzących narożniki dodajemy grupy metylowe, a następnie łączymy je pojedynczymi wiązaniami



4. Tę ostatnią strukturę poddajemy optymalizacji trójwymiarowej i dostajemy:



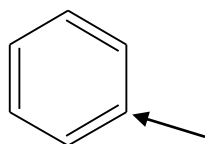
5. W oknie *3D Viewera* cząsteczka wygląda następująco:



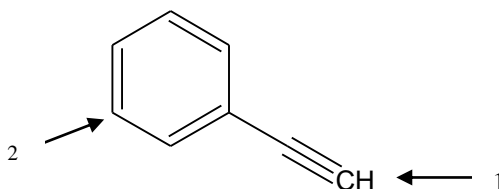
Rysowanie zaawansowane: Szablony (Templates)

Wśród narzędzi dostępnych w ChemSketch bardzo przydatna jest *Instant Template* (natychmiastowa kopia) – przycisk z dwoma sześciącami, który znajduje się przed przyciskiem *Clean*. Wykorzystamy go teraz do stworzenia struktury cyklicznego oligomeru.

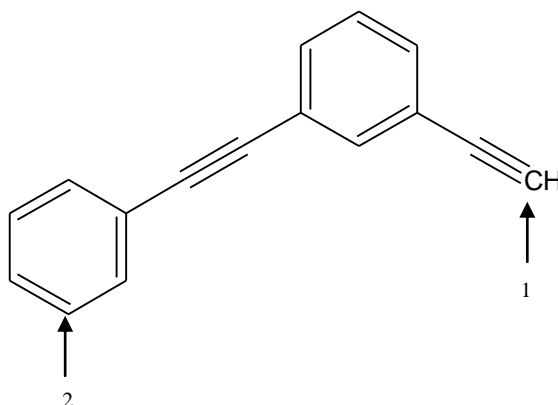
1. Z *tabeli rodników* wybieramy *benzen* i umieszczamy go w górnej części obszaru roboczego:



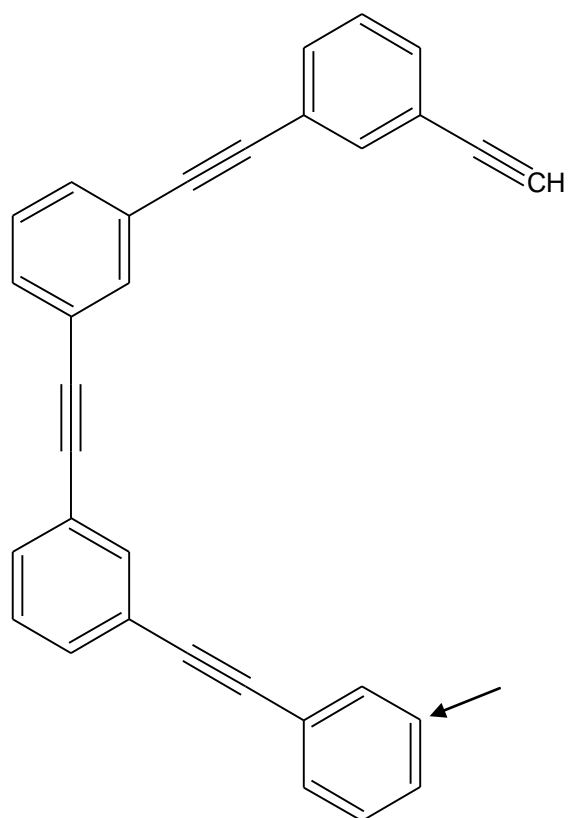
2. Także z *tabeli rodników* wybieramy *etynyl* i dołączmy do atomu wskazanego przez strzałkę powyżej.



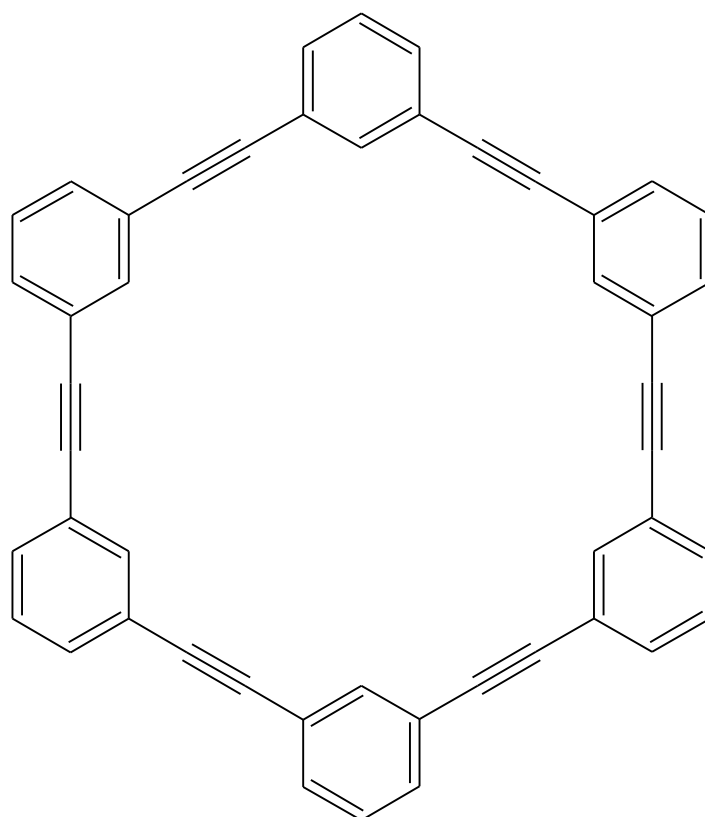
3. Naciskamy przycisk *Instant Template* i klikamy w atom wskazany przez strzałkę 1.
4. Tak utworzoną kopię dołączamy do atomu wskazanego przez strzałkę 2.



5. Jeszcze raz naciskamy *Instant Template* i klikamy w atom wskany strzałką 1, tworząc w ten sposób szablon całego fragmentu cząsteczki, a potem przyczepiamy go w miejscu wskazanym przez strzałkę 2.



6. Ten sam fragment doczepiamy w miejscu oznaczonym strzałką i otrzymujemy:

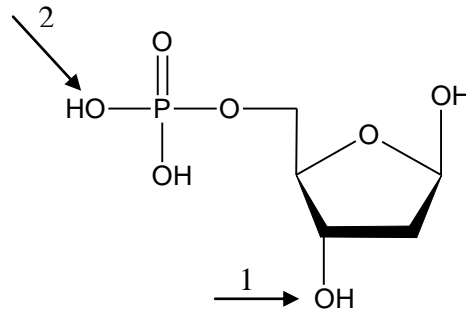


Uwaga: Ostatnią linię należy przeciągnąć po przejściu do trybu *Draw Normal*.

Fragment DNA

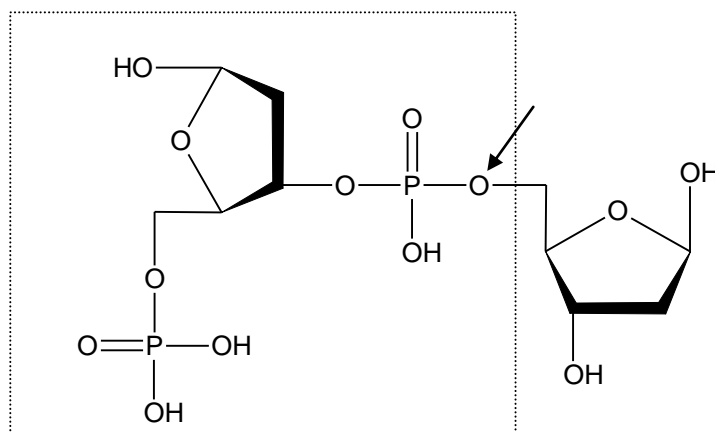
Narysujemy teraz fragment DNA, wykorzystując do tego *DNA / RNA Kit* z okna *Template*.

1. Wybierzmy 2-Deoxyribose-5-phosphate, klikając w oknie *szablonów* we wskazany strzałką nr 1 atom (będzie to punkt łączenia!).

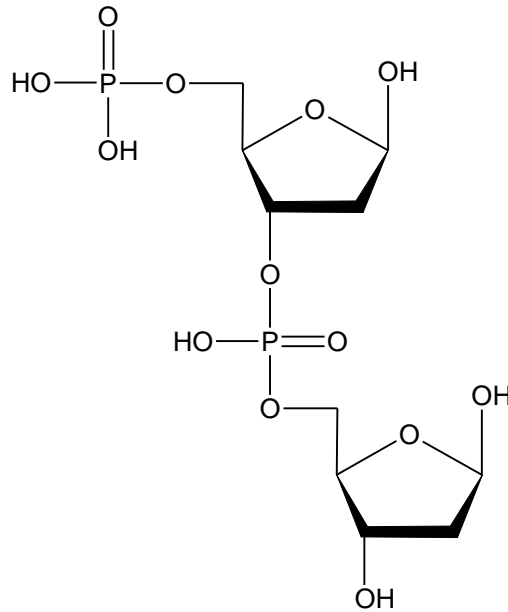


2-Deoxyribose-5-phosphate

2. Umieściwszy kursor nad atomem wskazanym strzałką 2, kliknij (wciskając jednocześnie klawisz **Shift**), żeby dołączyć kolejny fragment 2-Deoxyribose-5-phosphate.

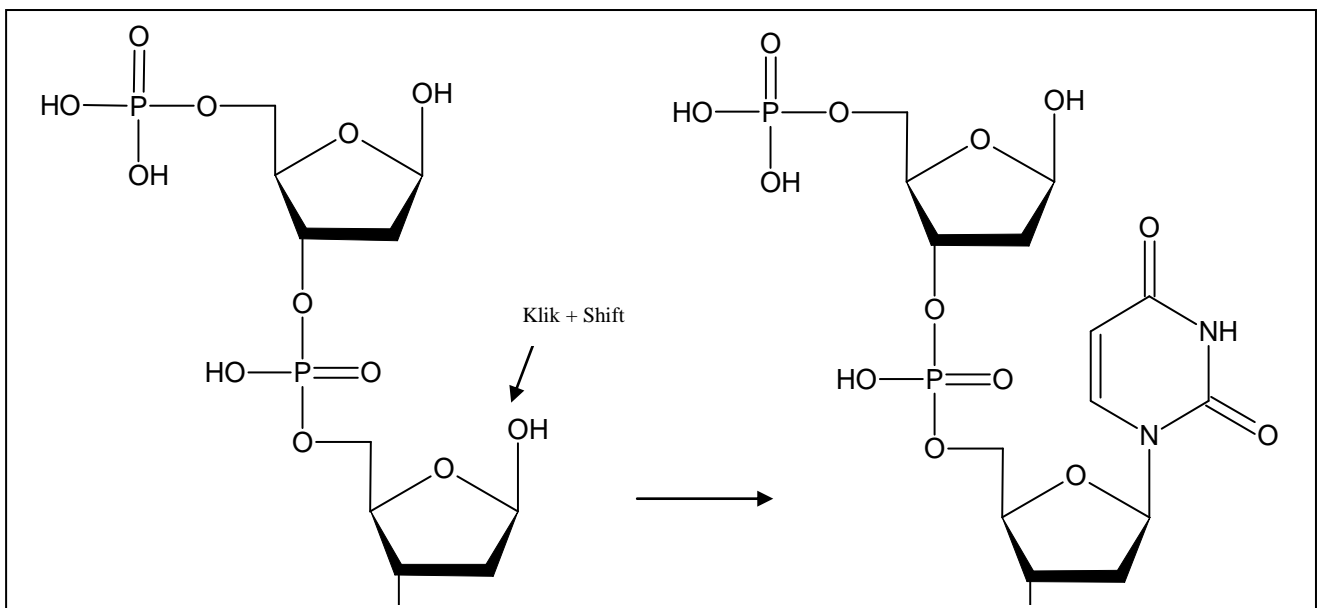
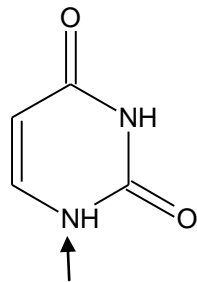


3. Po wybraniu narzędzia *Select / Rotate / Resize* zaznacz część struktury wraz z atomem O wskazanym strzałką, obejmując ją prostokątem. Następnie przenieś środek obrotu na atom tlenu (strzałka na rys. powyżej) i wciskając *Shift* obróć zaznaczony fragment o 90 stopni w kierunku przeciwnym ruchowi wskazówek zegara. Otrzymasz:

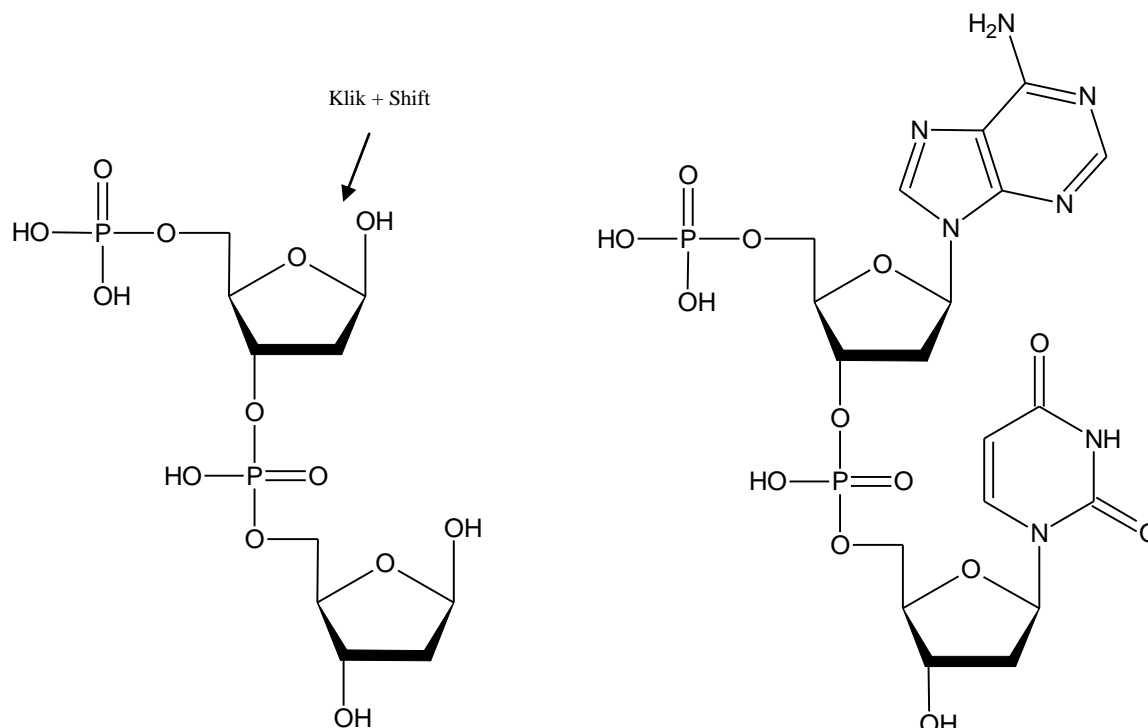


Dodawanie baz.

W oknie szablonów wybieramy z menu *DNA / RNA* oraz wybieramy zasadę, np. *uracil*, klikając w atom azotu, który będzie wykorzystany jako punkt przyłączenia.



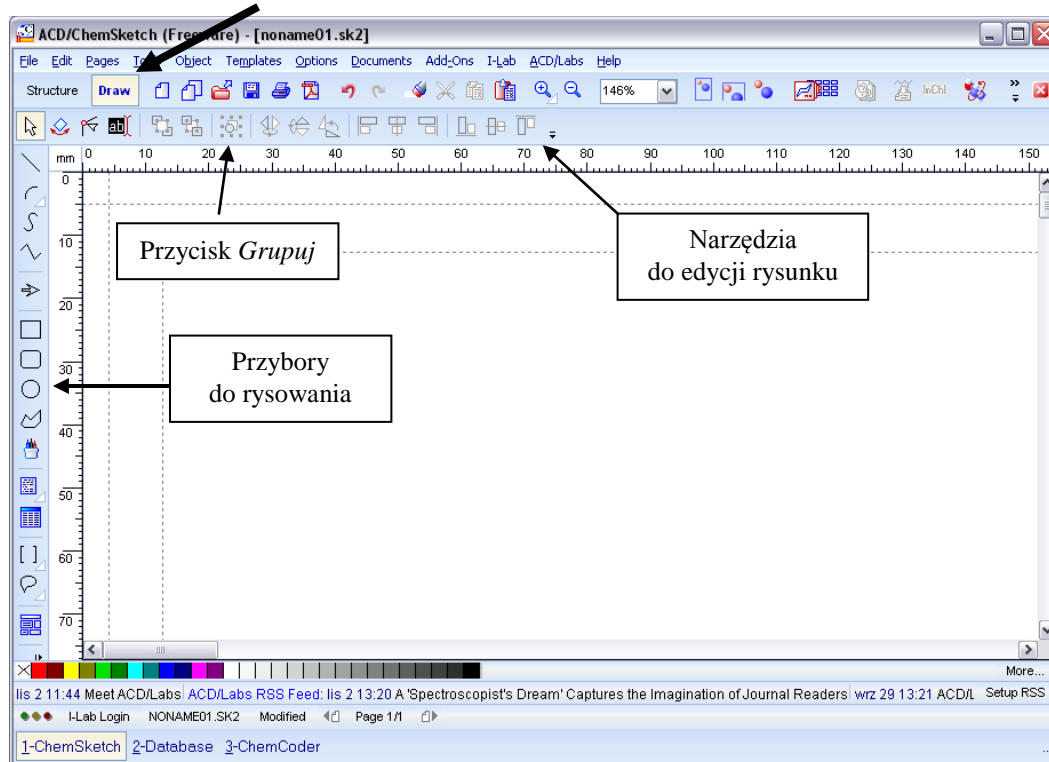
Powtarzając powyższe kroki, można dodawać zasady do innych nukleotydów. Zrobimy to dla przykładu z adeniną.



Tryb Draw

Rysowanie aparatu do destylacji próżniowej

Po kliknięciu przycisku Draw okno programu zmienia swój wygląd:

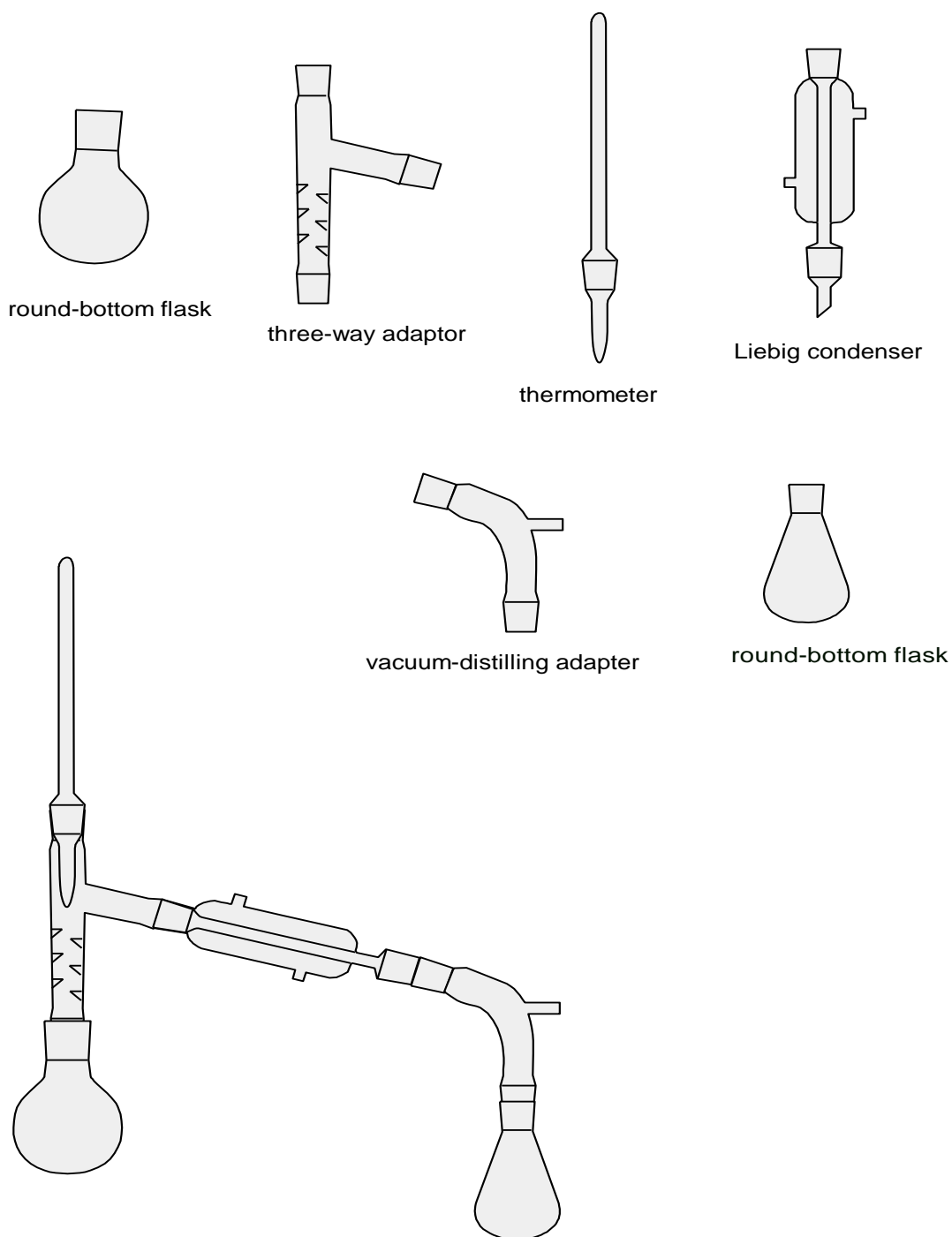


Pojawiły się nowe paski narzędzi (wskazane na powyższym rysunku).

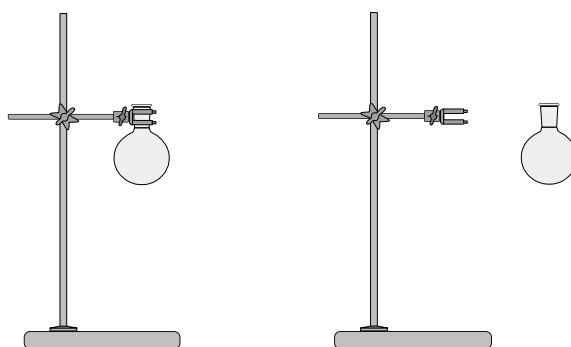
Wykorzystamy teraz ten tryb do wykonania schematu aparatury.

1. Przełączamy się do trybu **Draw** i ustawiamy *Zoom* na np. 75%
2. W oknie *Template* wybieramy *Lab Kit*.
3. Z tego okna wybieramy kolejno elementy aparatury.

Przy okazji warto przećwiczyć działanie wszystkich przycisków z paska edycji (flip itd.).



4. Poszczególne elementy łączymy, klikając. Naciśnięcie *prawego przycisku myszki* likwiduje cień. Chcąc odpowiednio obrócić *kondensator Liebiga*, naciskamy klawisz *Select/Move/Rotate* i obracamy wybrany obiekt (ok. 73° w kierunku przeciwnym kierunkowi ruchu wskazówek zegara)
5. Podpisy na rysunku można umieścić po naciśnięciu przycisku *Text*, po lewej stronie ekranu. Przedtem można wybrać rodzaj i rozmiar czcionki, wykorzystując *Font Panel* z menu *Tools*. Jest tam również *Paragraph Panel* do formatowania akapitów. Jeśli w trakcie pisania przez przypadek wypadnie się poza ramkę, można do niej wrócić przy pomocy narzędzia *Edit Text*.
6. Po zaznaczeniu wszystkich lub części elementów, można je zgrupować, sklejając w jeden rysunek. Robi się to przy pomocy przycisku *Group* z paska edycji. Jeśli potrzebny nam jest element będący częścią któregoś z rysunków, wystarczy go rozgrupować i pobrać potrzebną część, np.:



Wprowadzanie „dymków”

Każdy tekst można ująć w „dymek”. Otrzymuje się je po naciśnięciu prawego dolnego narożnika przedostatniego z przycisków na lewym pasku narzędzi.

Tekst



Tekst

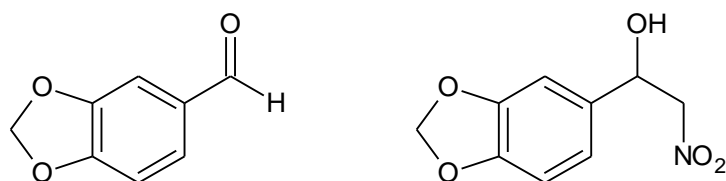


W ten sposób można narysować schematy różnych aparatów, opatrując je w odpowiednie opisy.

Łączenie pracy w trybie Structure i Draw

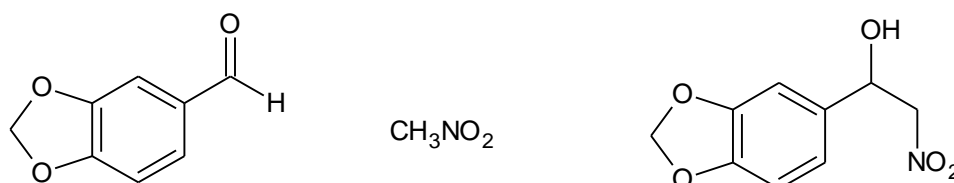
Równanie reakcji chemicznej możemy zapisać w trybie *Structure*.

1. W trybie *Structure* rysujemy wzory strukturalne substratu i produktu reakcji:

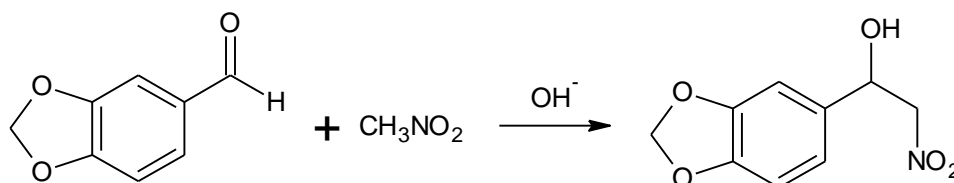


(Grupę NO₂ dodaj używając ikony *Edit Atom Label*)

2. Używając ponownie *Edit Atom Label* wstaw pomiędzy obie struktury wzór CH₃NO₂

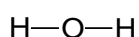


3. Dodaj jeszcze strzałkę reakcji, znak + oraz jon OH⁻

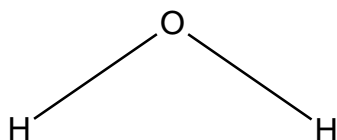


Teraz narysujemy wzór cząsteczki wody.

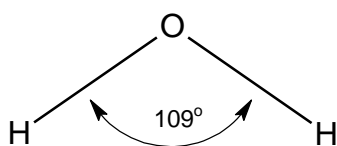
1. Wybierz atom tlenu i kliknij w obszar roboczy. Otrzymamy w ten sposób H₂O.
2. Z menu *Tools* wybierz *Add Explicite Hydrogens*:



3. Użyj optymalizacji 3D.
4. Przełącz się do trybu *Draw*. Powiększ cząsteczkę. Następnie korzystając z menu *Tools* dobierz odpowiednią grubość linii (*Pen Style Panel*) oraz liter (*Font Panel*):



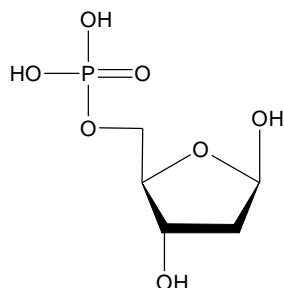
5. Na koniec dorysuj łuk zakończony strzałkami i dodaj etykietę z wartością kąta:



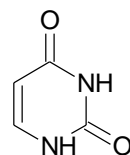
Style i szablony

Praca z różnymi stylami w trybie **Structure**.

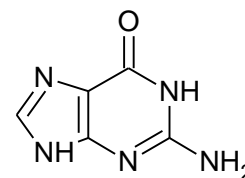
Narysujemy teraz fragment DNA, wykorzystując do tego *DNA / RNA Kit* z okna *Template*.



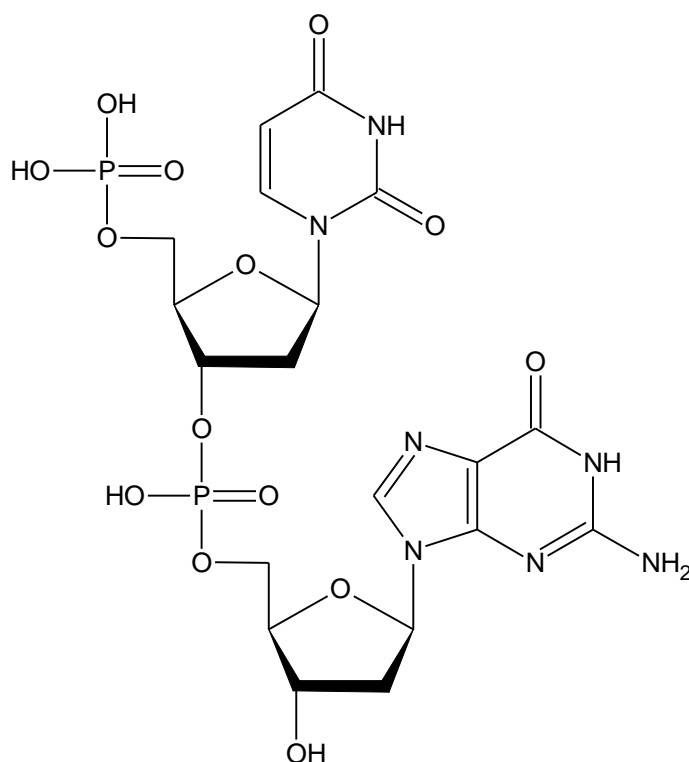
2-Deoxyribose-5-phosphate



Uracil



Guanine

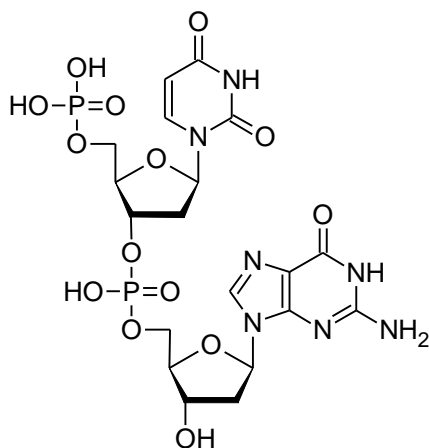


Łącząc poszczególne elementy, należy używać kombinacji SHIFT + kliknięcie, gdyż wtedy nie tworzy się dodatkowych wiązań.

Zalóżmy teraz, że napisaliśmy artykuł naukowy, w którym chcemy zaprezentować taką strukturę. Różne pisma swoje style, do których trzeba się dostosować. ChemSketch zrobi to za nas. Gdybyśmy np. wybrali *Journal of Organic Chemistry*, należy zrobić, co następuje:

1. Zaznaczamy naszą molekułę
2. Klikamy dwa razy w jeden z „chwytaków”

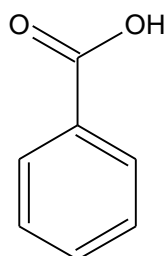
Otwiera się okno *Properties*. Rozwijamy menu znajdujące się tuż pod napisem tytułowy. Jest to spis stylów używanych w różnych czasopismach naukowych. Wybierzmy JOC style (Journal of Organic Chemistry) i zatwierdźmy wybór, naciskając przycisk *Apply* (zastosuj). Otrzymamy następującą strukturę:



Proszę poćwiczyć inne style dostępne w programie.

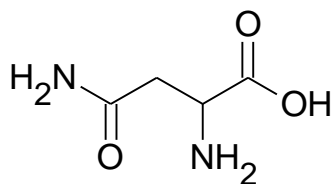
Obliczanie własności makroskopowych związków

ChemSketch umożliwia również obliczenie pewnych własności fizykochemicznych związków. Wymieniono je już na początku opracowania.



Molecular Formula	= C ₇ H ₆ O ₂
Formula Weight	= 122.121
Composition	= C(68.85%) H(4.95%) O(26.20%)
Molar Refractivity	= 33.18 ± 0.3 cm ³
Molar Volume	= 101.9 ± 3.0 cm ³
Parachor	= 269.4 ± 4.0 cm ³
Index of Refraction	= 1.564 ± 0.02
Surface Tension	= 48.7 ± 3.0 dyne/cm
Density	= 1.197 ± 0.06 g/cm ³
Dielectric Constant	= Not available
Polarizability	= 13.15 ± 0.5 10 ⁻²⁴ cm ³
Monoisotopic Mass	= 122.03678 Da
Nominal Mass	= 122 Da
Average Mass	= 122.123724 Da

Najpierw rysuje się odpowiedni wzór. Następnie należy z menu *Tools* wybrać opcję *Calculate*. Można obliczać wybraną własność lub wszystkie. Po naciśnięciu *Copy to Editor* wszystkie własności zostają przeniesione skopiowane na ekran.



Asparagine (Asn)

Molecular Formula	= C ₄ H ₈ N ₂ O ₃
Formula Weight	= 132.118
Composition	= C(36.36%) H(6.10%) N(21.20%) O(36.33%)
Molar Refractivity	= 29.20 ± 0.3 cm ³
Molar Volume	= 94.0 ± 3.0 cm ³
Parachor	= 273.6 ± 4.0 cm ³
Index of Refraction	= 1.533 ± 0.02
Surface Tension	= 71.6 ± 3.0 dyne/cm
Density	= 1.404 ± 0.06 g/cm ³
Dielectric Constant	= Not available
Polarizability	= 11.57 ± 0.5 10 ⁻²⁴ cm ³
Monoisotopic Mass	= 132.053493 Da
Nominal Mass	= 132 Da
Average Mass	= 132.119317 Da

Praca z szablonami (templates)

Program ChemSketch zawiera wiele *szablonów (templates)*, które nie są ujęte w oknie *Templates*. Łatwo to zmienić. Należy otworzyć menu *Templates* na pozycji *Template Organizer*. Tam jest spis wszystkiego, czym program dysponuje.

Chcąc włączyć np. *fulereny* do okna szablonów, postępujemy następująco:

1. Zaznaczmy w organizatorze *Fullerens*
2. Naciskamy przycisk *Open Document*
3. Po obejrzeniu tego, co się ukaże, możemy zrezygnować lub zapisać to w oknie szablonów poprzez wybranie w menu *Templates* opcji *Save User Template*. Program zapyta jeszcze pod jaką nazwą chcemy to zapisać, po czym wykona polecenie.

Proszę przećwiczyć to na kilku przykładach.

Usuwanie określonych zbiorów szablonów.

1. Otwieramy okno szablonów
2. Wybieramy to, co chcemy usunąć
3. Naciskamy przycisk *Remove*