

Wprowadzenie do programu 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)

3D Viewer pozwala obejrzeć trójwymiarowe modele cząsteczek.

Okno programu

The image shows the ACD/ChemSketch software interface with several callout boxes pointing to specific features:

- Tryby pracy: Structure - Draw** (Work modes: Structure - Draw)
- Cofnij, ponów** (Undo, redo)
- Gumka - Usuń** (Eraser - Delete)
- Szablony Templates** (Templates)
- 3D Viewer**
- Przenoszenie, rotacja, rotacja 3D, zaznaczanie** (Moving, rotation, 3D rotation, selection)
- Rysowanie normalne, Rysowanie ciągłe, Rysowanie łańcuchów** (Normal drawing, Continuous drawing, Chain drawing)
- Zmiana pozycji Ustaw wiązanie poziomo Ustaw wiązanie pionowo** (Position change, Set horizontal bond, Set vertical bond)
- Układ okresowy pierwiastków** (Periodic table of elements)
- Popularne pierwiastki** (Popular elements)
- Clean Structure Wyczyść strukturę** (Clean Structure, Clean structure)
- Optymalizacja 3D** (3D optimization)
- Tablica rodników (podstawników)** (Substituent table)
- Popularne podstawniki** (Popular substituents)
- Edit Atom Label Wzory sumaryczne** (Edit atom label, Summary formulas)
- Zmiana ładunku** (Charge change)

The main workspace displays a chemical structure of methane (CH4).

Rysowanie prostych wzorów strukturalnych

Proste związki nieorganiczne

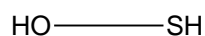
Przystępując do rysowania wzorów strukturalnych, należy przełączyć program do trybu *Structure* i wybrać narzędzie (ołówek) *Draw Normal*.

1. Na pasku atomów po lewej stronie wybierz tlen O i kliknij na środku ekranu – pojawi się tam wzór cząsteczki H_2O .

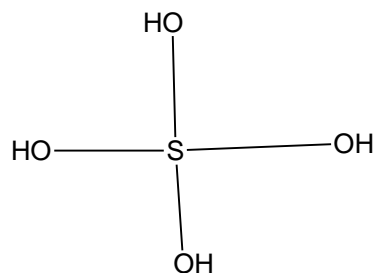
2. Następnie wybierz siarkę S i kliknij obok wzoru wody – pojawi się H_2S :



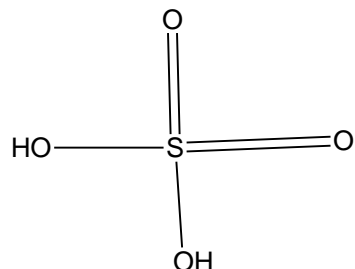
3. Połącz obie cząsteczki przeciągając myszką od jednej do drugiej. Otrzymasz:



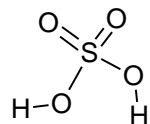
4. Wokół siarki umieść 3 kolejne cząsteczki wody i połącz je z atomem siarki:



5. Kliknij w dwa wybrane wiązania S-O tworząc wiązania podwójne:



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

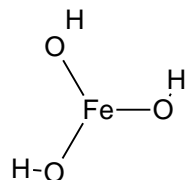


7. Możesz teraz tę cząsteczkę obrócić, przesunąć lub powiększyć.

W podobny sposób narysuj cząsteczkę wodorotlenku żelaza(III):

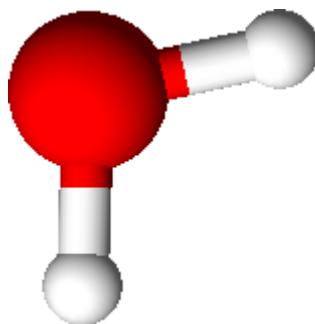
1. Z układu okresowego wybierz atom Fe, umieść go na środku kartki – pojawi się tam jon Fe^{2+} .

2. Na dole paska atomów wybierz przycisk 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:

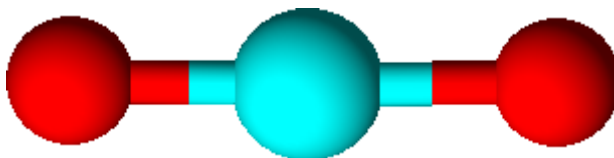


W podobny sposób spróbuj otrzymać wzory i modele innych prostych cząsteczek, np.:

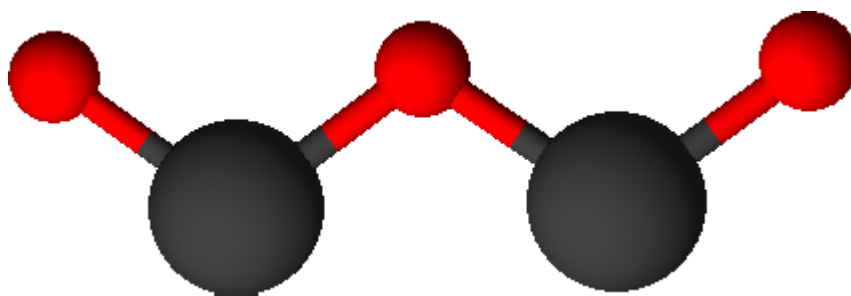
- H_2O



- CO_2



- Al_2O_3 .

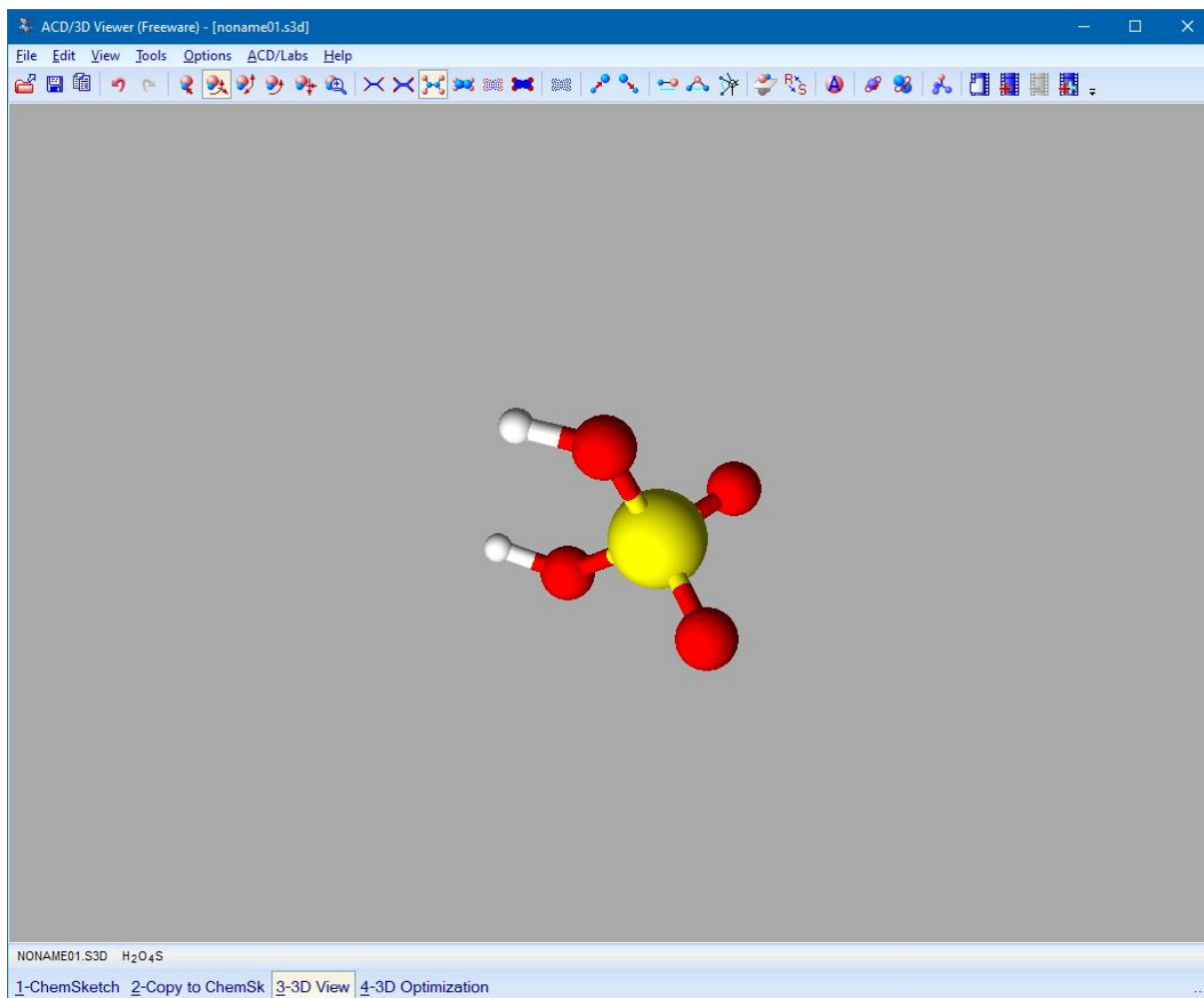


Model każdej z cząsteczek możesz obejrzeć w *3D Viewerze*.

3D Viewer

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

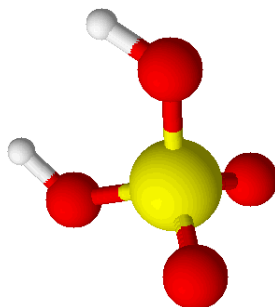
Uruchamia się ją z menu *ACD/Labs* lub po prostu klikając w ikonę *3D Viewer* na górnym pasku narzędzi (patrz rysunek na stronie 3). Otworzy się takie okno:




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

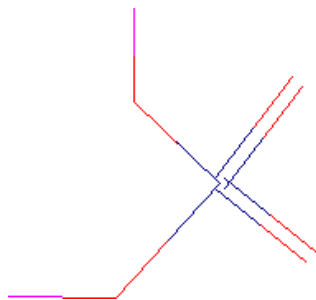
Jeżeli nie widzisz atomów wodoru kliknij ikonę optymalizacji 3D.

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:

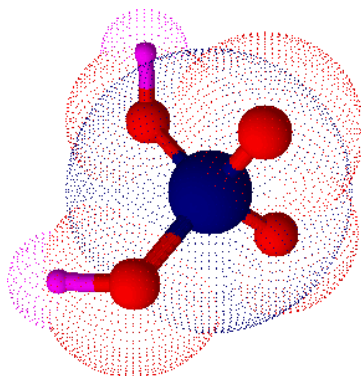


Model cząsteczki można wprawiać w ruch, używając myszki lub funkcji *Auto rotate*.

Jeśli interesuje cię krotkość wiązań, wybierz widok *Wireframe* 

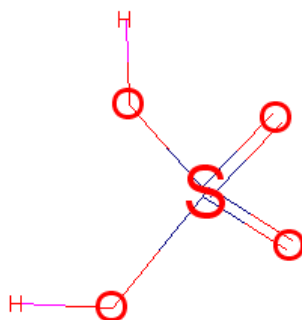


Można też zobaczyć promienie atomowe (pokazane linią przerywaną) włączając *With Dots*:




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

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

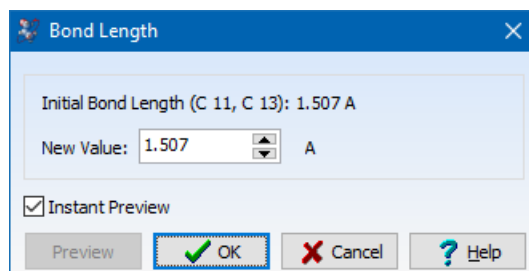


3D Viewer umożliwia także obliczenie długości konkretnych wiązań i kątów w cząsteczce.

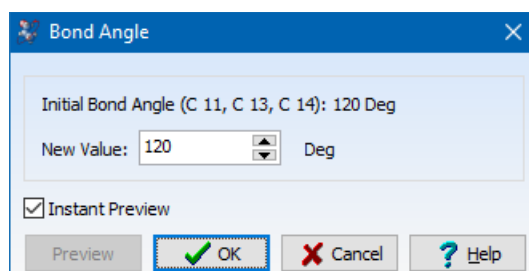
Aby zmierzyć odległość między atomami tlenu w cząsteczce powyżej:

1. Przełącz się na widok *Balls and Sticks*
2. Kliknij przycisk *Bond Length* 
3. Wskaż myszką najpierw pierwszy, potem drugi atom (zaznaczone atomy zmieniają kolor na zielony).

Wyświetli się okno pokazujące długość wiązania w angstromach [Å]:

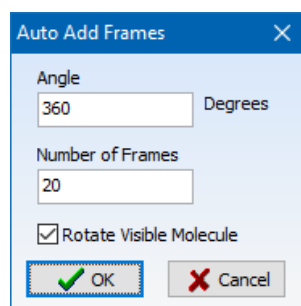


W podobny sposób wskazując trzy atomy możesz wyznaczyć kąt między nimi.



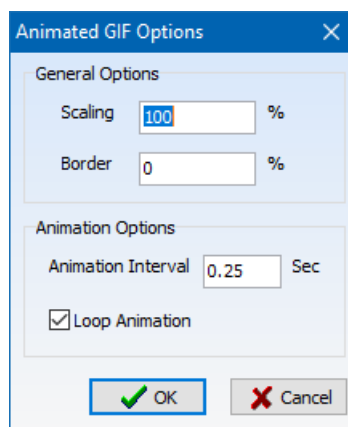
Cztery ostatnie ikonki na pasku narzędzi pozwalają stworzyć własny animowany plik GIF.

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



3. Zmień ilość klatek (*Frames*) np. na 60 i kliknij OK.
4. Po obejrzeniu animacji zapisz wynik pracy (menu *File – Save As...*) wpisując dowolną nazwę pliku i wybierając typ pliku: *Animated GIF*.

W oknie zapisu po kliknięciu w przycisk *Options...* możesz ustalić dalsze szczegóły:

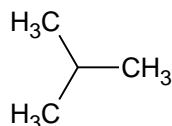


5. Na koniec zobacz podgląd stworzonego pliku.

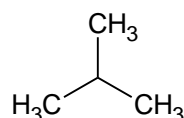
Poszczególne klatki do filmu możesz oczywiście dodawać też ręcznie.

Wzory strukturalne związków organicznych

1) Po upewnieniu się, że aktywne jest narzędzie *Draw Normal*, a wybranym atomem jest węgiel, kliknij na środku kartki wstawiając cząsteczkę CH₄. Teraz kliknij jeszcze **3 razy w to samo miejsce (środkowy atom C stanie się niewidoczny)** uzyskując:

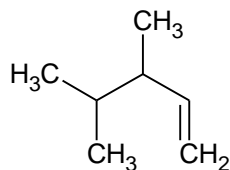



a po obrocie (kliknij *Set Bond Vertically* i wskaż wiązanie skierowane ku górze) otrzymasz:

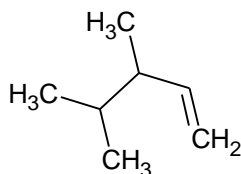


Przećwicz na tej prostej molekułe operacje ustawienia wiązań *Set Bond...* i *Flip...* oraz zmiany wiązań na podwójne, potrójne i znów pojedyncze (aby zmienić krotność wiązania należy po prostu klikać myszką w dane wiązanie).


Dołącz kolejne trzy grupy CH₃ **klikając w dwa dolne atomy węgla (dwukrotnie w lewy i raz w prawy)** i zmień jedno wiązanie po prawej stronie na podwójne:

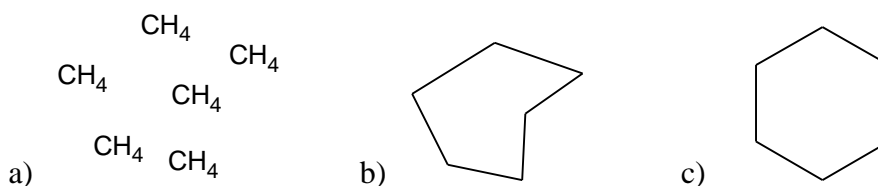


Wzór cząsteczki możesz także obracać używając narzędzia *Select/Rotate/Resize* :

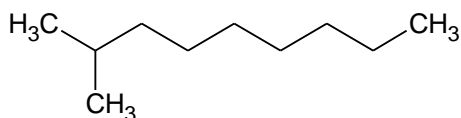


2) Poniżej przykład dosyć niechlujnie rysowanego cykloheksanu i działania operacji *Clean Structure*, która standaryzuje długości wiązań i kąty, tak aby rysunek był poprawny z chemicznego punktu widzenia.

Wybierz *Draw Normal*, atom C i umieść 6 grup CH₄ w dowolnych miejscach na kartce (a), a następnie połącz je wiązaniami (b). Sprawdź efekt działania ikony *Clean Structure*  (c).



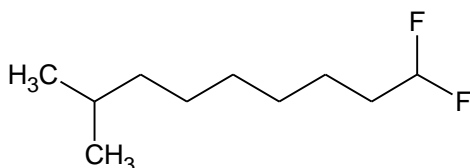
3) Używając ołówka *Draw Normal* i narzędzia *Set Bond Vertically* zbuduj wzór – kolejne grupy CH₃ przyłączasz klikając w skrajny atom węgla (w razie potrzeby z klawiszem *Ctrl*):



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

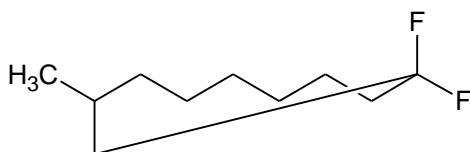
Wybierz ołówek *Draw Continuous*, atom fluoru i **kliknij dwukrotnie w ostatnią grupę CH₃**.

Przyłączy się pierwszy F. Powtórz operację aby przyłączyć drugi. Otrzymasz:

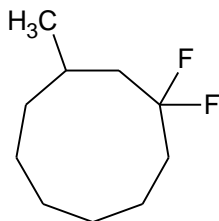


Gdybyśmy użyli *Draw Normal*, atom F zastąpiłby atom C, zamiast się do niego przyłączyć.

W obu trybach (*Draw Normal* i *Continuous*) można myszką *rysować* wiązania, tak jak to zrobiono poniżej łącząc dwa odległe atomy węgla.



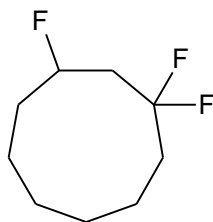
Po zastosowaniu przycisku *Clean Structure* tworzy się cząsteczka cykliczna.




Jeżeli grupa CH₃ i atomy F znajdują się w dole pierścienia to kliknij w ikonę *Flip Top to Bottom*, aby odwrócić pierścień.

Następnie wykonaj następujące operacje:

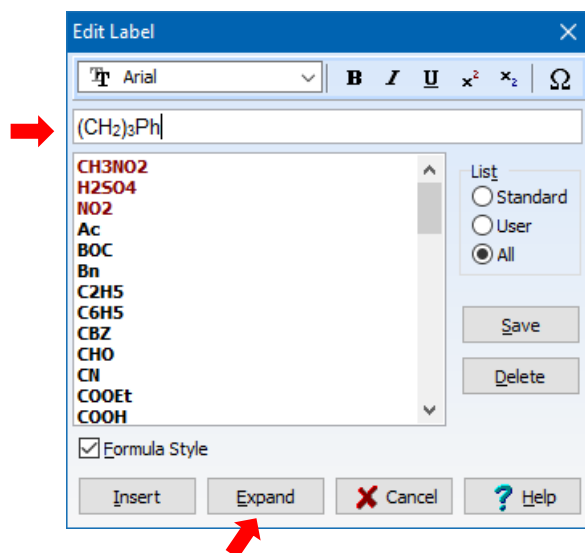
1. Ostatnią grupę CH₃ zastąp fluorem.



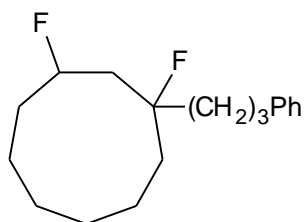
2. Ostatni z fluorów po prawej stronie zastąpimy wzorem sumarycznym grupy funkcyjnej zawierającej między innymi grupę fenyłową (skrót *Ph*). Wstawianie jej umożliwi

przycisk *Edit Atom Label*  (znajduje się on na lewym pasku narzędzi, pod ikonami pierwiastków).

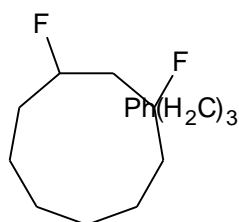
- Po jego uaktywnieniu klikamy w wybrany atom fluoru i zastępujemy go grupą, której wzór sumaryczny wpisujemy w oknie *Edit Label* - w tym wypadku jest to wzór $(\text{CH}_2)_3\text{Ph}$ (indeksy tworzone są automatycznie):



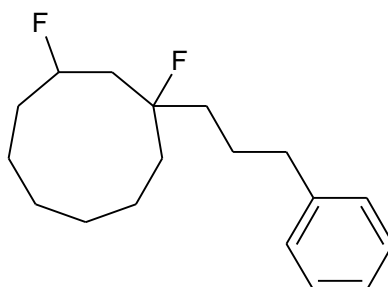
- Otrzymamy:



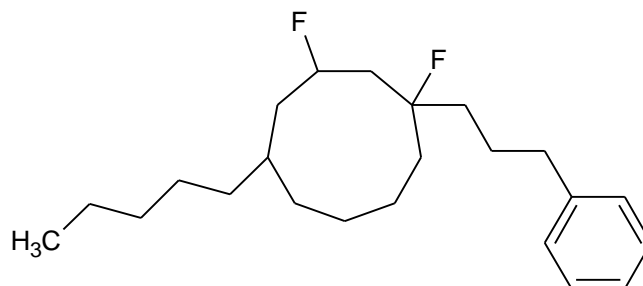
- Odwróćmy dodaną grupę stosując narzędzie *Change Position*:



- Możemy rozwinąć wzór sumaryczny do strukturalnego. Klikamy ponownie w ikonę *Edit Atom Label*, a następnie we wstawioną grupę i naciskamy *Expand* w oknie dialogowym.



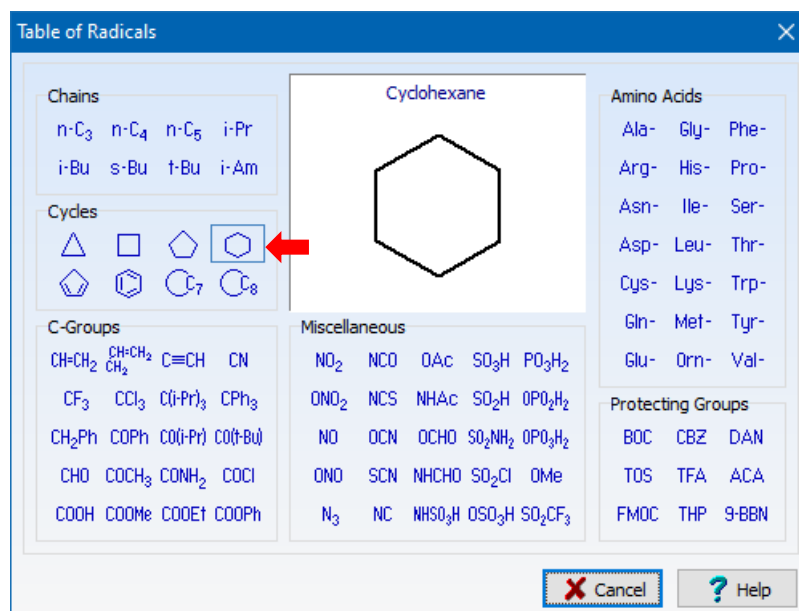
7. Łańcuch po lewej stronie, który widać na poniższym rysunku został dorysowany przy użyciu ołówka *Draw Chains*:



Używanie struktur pierścieniowych

Na pionowym pasku narzędzi po prawej stronie kliknij w ikonę *Table of Radicals*:

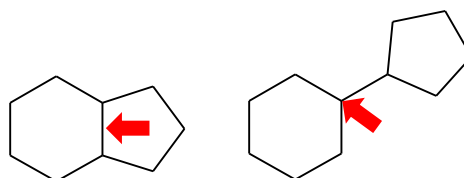
Wskaż najpierw *cykloheksan*, wstaw go na środku kartki i dołącz do niego *cyklopentan*.



Pierścienie można połączyć tworząc jedno wspólne wiązanie lub łącząc ich narożniki.

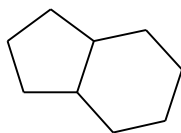
Decyduje o tym położenie **czubka strzałki** kursora myszy.

Sprawdź to:

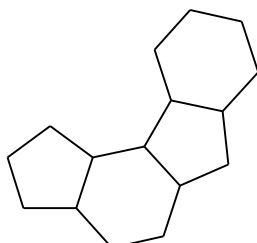



Aby uzyskać pierwszą strukturę, strzałka kursora po wybraniu *cyklopentanu* musi wskazać środek jednego z wiązań *cykloheksanu*, które stanie się miejscem łączenia. Struktura po prawej stronie powstanie po wskazaniu kursorem atomu C *cykloheksanu*.

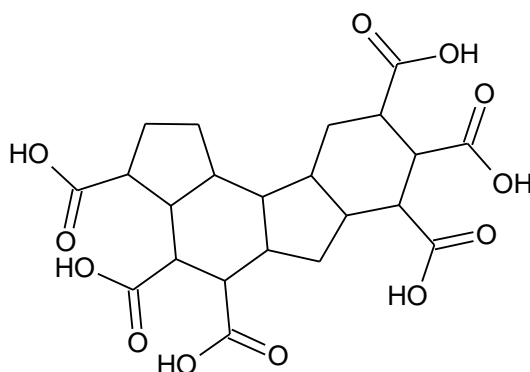
1. Łączymy najpierw poprzez wspólne wiązanie dwa pierścienie (5 i 6 krotny):



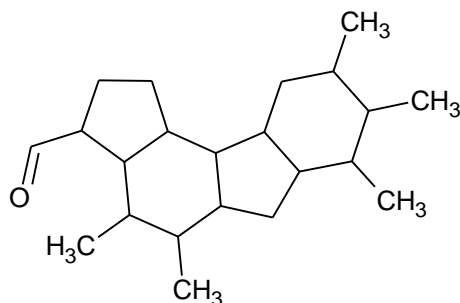
2. Dołączamy dwa kolejne pierścienie:



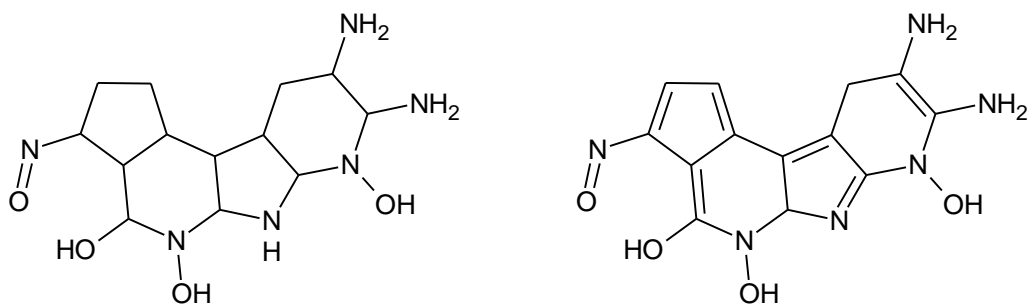
3. Obracamy cząsteczkę zgodnie z ruchem wskazówek zegara używając narzędzia *Select/Rotate/Resize* . Do wybranych atomów dołączmy (także z tabeli rodników) sześć grup karboksylowych COOH otrzymując cząsteczkę:



4. Na tej molekule można poćwiczyć usuwanie konkretnych atomów lub ich zamianę. Poniższy wzór otrzymamy usuwając gumką (*Delete*) wybrane atomy O i grupy OH:



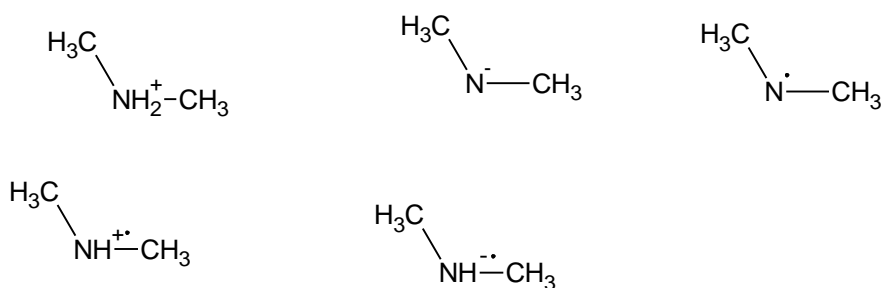
5. Następnie zastępujemy niektóre atomy C atomami azotu i tlenu (w trybie *Draw Normal*). Krotność wiązania można zmieniać przez kliknięcie w wybrane wiązanie.



Definiowanie anionów i kationów

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

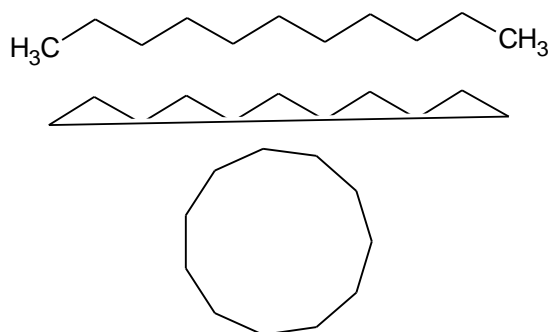
Przećwicz, uzyskując kolejno poniższe struktury:




Optymalizacja dwuwymiarowa:

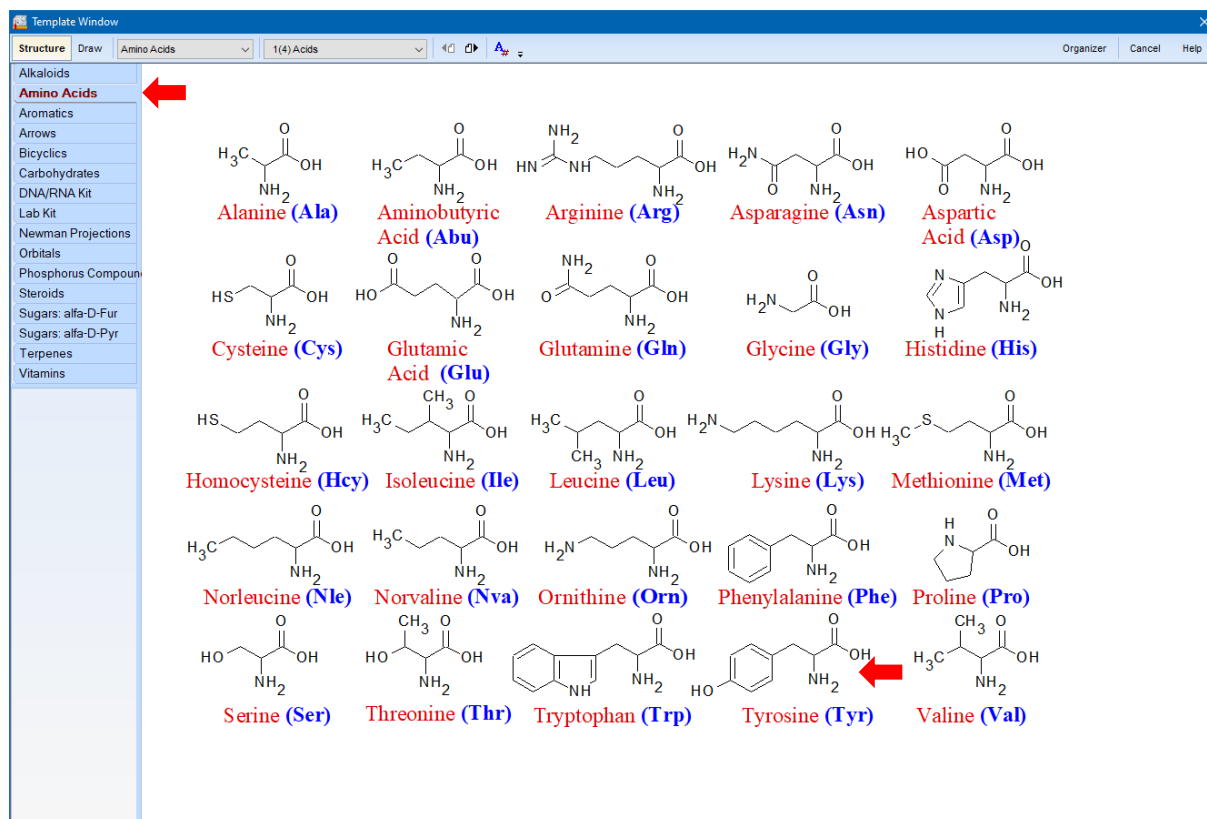
Ikona *Clean Structure* służy do przybliżonej optymalizacji dwuwymiarowej, gdyż jej zastosowanie prowadzi do ponownego narysowania płaskiego wzoru cząsteczki i standaryzacji długości wiązań i kątów. Wykonaj przykładowe ćwiczenie.

Najpierw w trybie rysowania łańcuchów (ołówek *Draw Chains*) tworzymy pierwszy wzór. Potem po przejściu do trybu *Draw Normal* łączymy ostatni atom C z pierwszym długim wiązaniem, a na koniec stosujemy *Clean Structure*.

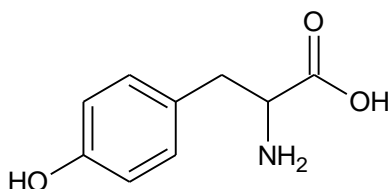


Tworzenie struktury cyklicznych peptydów.

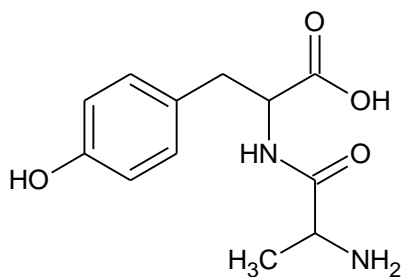
1. Po kliknięciu w ikonę  na pasku narzędzi, w oknie szablonów (*Template Window*) wybieramy aminokwasy, a z nich **wzór** (a nie nazwę) tyrozyny (*Tyrosine*)



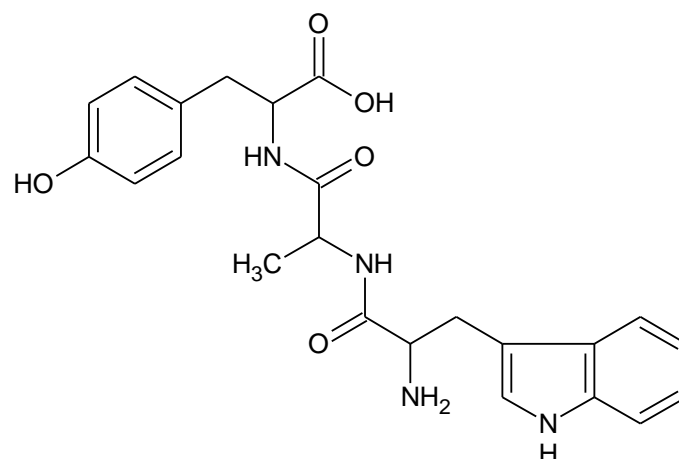
2. Klikamy na środku kartki:



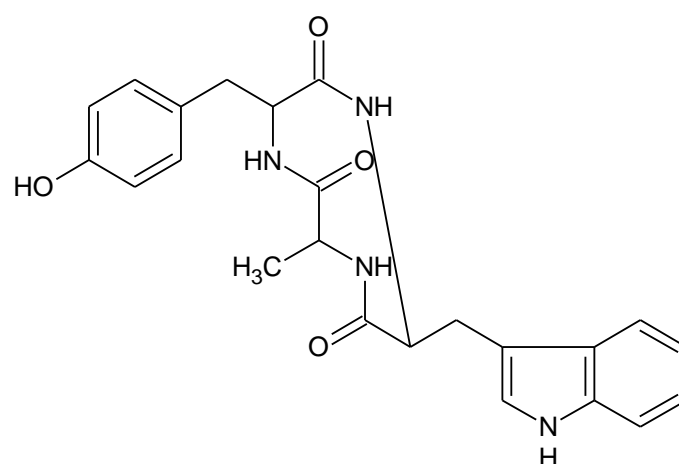
3. Z tabeli rodników (na prawym pasku narzędzi) wybieramy *Alaninę* (Ala-) i doczepiamy ją do grupy NH₂ tyrozyny:



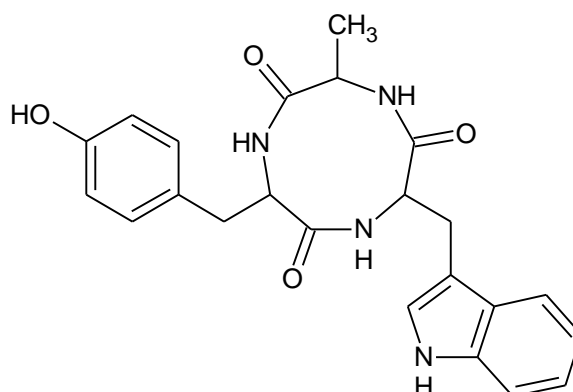
4. Z tabeli rodników wybieramy *Tryptofan* ((Trp-) i doczepiamy ponownie w miejsce grupy NH₂:



5. Przechodzimy do trybu *Select/Move* i przeciągamy grupę NH₂ do grupy OH.



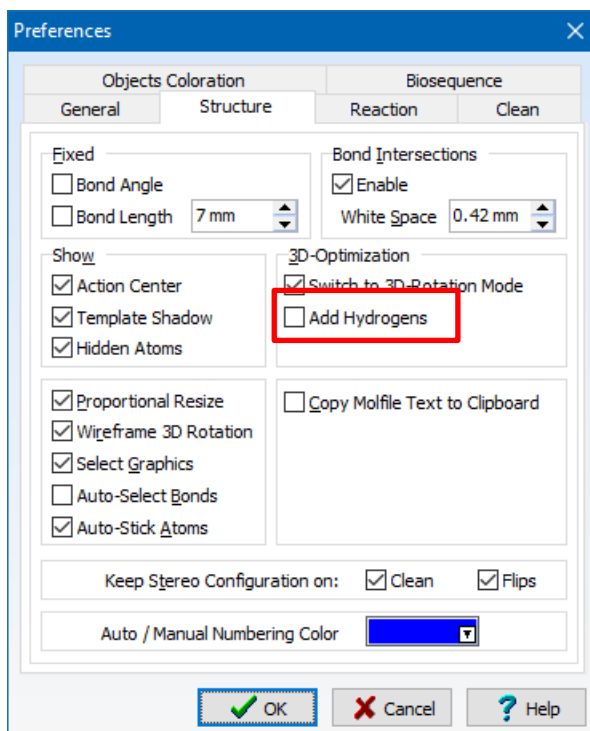
6. Teraz wystarczy zastosować operację *Clean Structure* żeby otrzymać wzór:



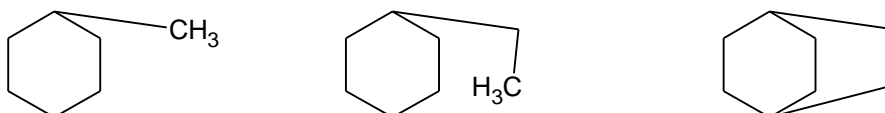
Optymalizacja trójwymiarowa

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

1. W menu *Options* wybieramy *Preferences* i przełączmy się do *Structure*. Tam **wyłączamy** *Add Hydrogens* i naciskamy *OK*. Dzięki temu po optymalizacji 3D atomy wodoru nie będą nadal wyświetlane.



2. Z tabeli rodników kopiujemy cykloheksan.
3. W trybie *Draw Normal* tworzymy most węglowodorowy, tak jak to pokazano na kolejnych rysunkach poniżej.



4. Wybieramy optymalizację 3D i potem obracamy cząsteczkę (*3D Rotation*) otrzymując strukturę przypominającą *latawca*:



5. Wykorzystamy teraz 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 for Structure*. Otrzymamy nazwę:

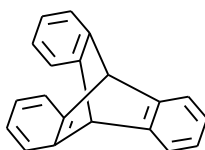
bicyclo[2.2.2]octane

Rozbudujmy teraz *dicyklooktan* o benzeny.

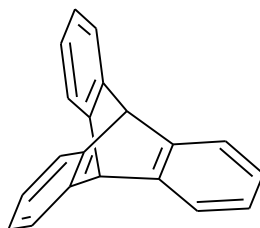
1. Wzór *dicyklooktanu* możemy narysować ponownie lub pobrać z okna *szablonów* (*Template - Bicyclics*)



2. Z *tabeli rodników* wybieramy *benzen* i przyłączmy go do trzech **wiązań tworzących skrzydła latawca**. Otrzymujemy taką np. strukturę:

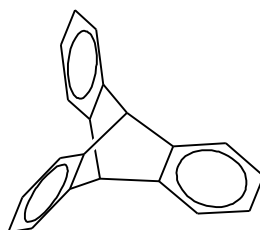


3. Po zastosowaniu *optymalizacji 3D* uzyskuje ona postać:



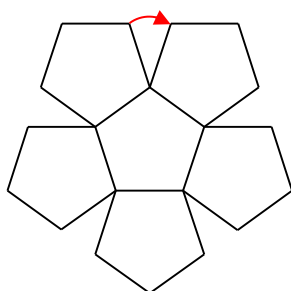
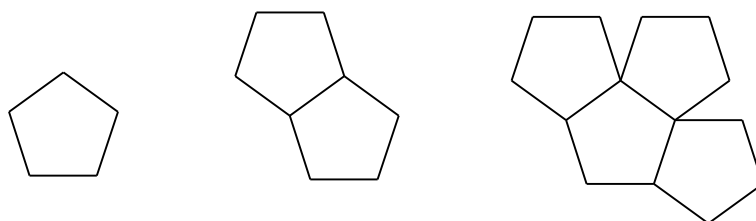
Uwaga: Czasem optymalizacja trójwymiarowa nie może być wykonana, gdyż wyjściowa struktura jest zbyt „pokręcona”. Należy wówczas najpierw zastosować operację Clean, a potem jeszcze raz spróbować zoptymalizować strukturę w 3D.

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

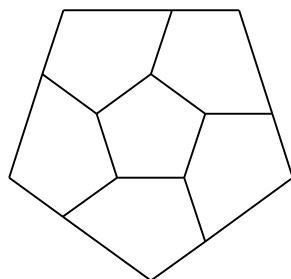


Tworzenie struktury *dodekahedranu*

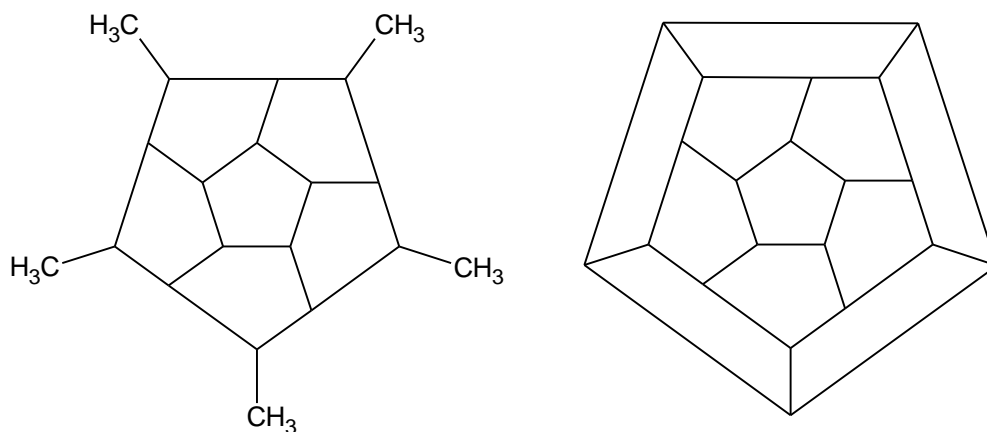
1. Najpierw z *cyklopentanów* tworzymy to, co poniżej.



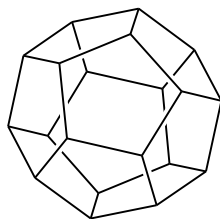
2. Następnie **uruchamiamy tryb *Select/Move*** i ciągniemy zgodnie z ruchem wskazówek zegara odpowiednie atomy do sąsiednich (czerwona strzałka powyżej). Otrzymujemy coś takiego:



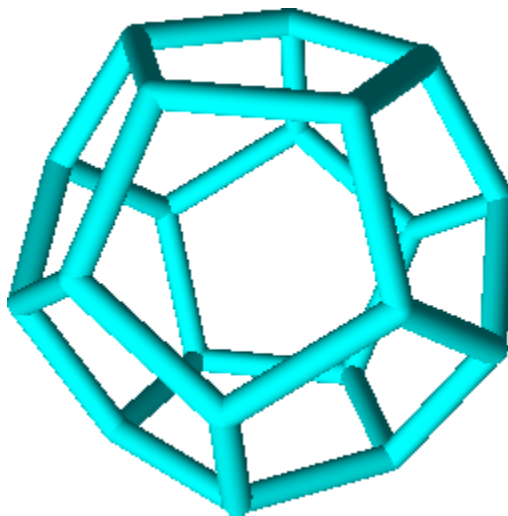
3. Do atomów tworzących narożniki dodajemy grupy metylowe **wybierając ołówek *Draw Normal*** i klikając w narożniki, a następnie łączymy je pojedynczymi wiązaniami



4. Tę ostatnią strukturę poddajemy optymalizacji 3D i dostajemy:



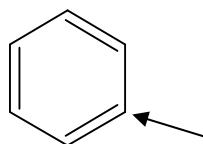
5. W oknie *3D Viewera* cząsteczka wygląda np. tak:



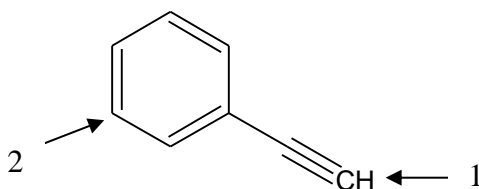
Rysowanie zaawansowane: Szablony (Templates)


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

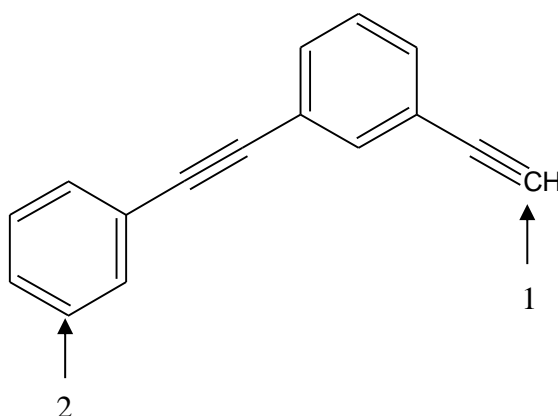
1. Z tabeli rodników wybieramy *benzen* i umieszczamy go w **w górnej części** obszaru roboczego:



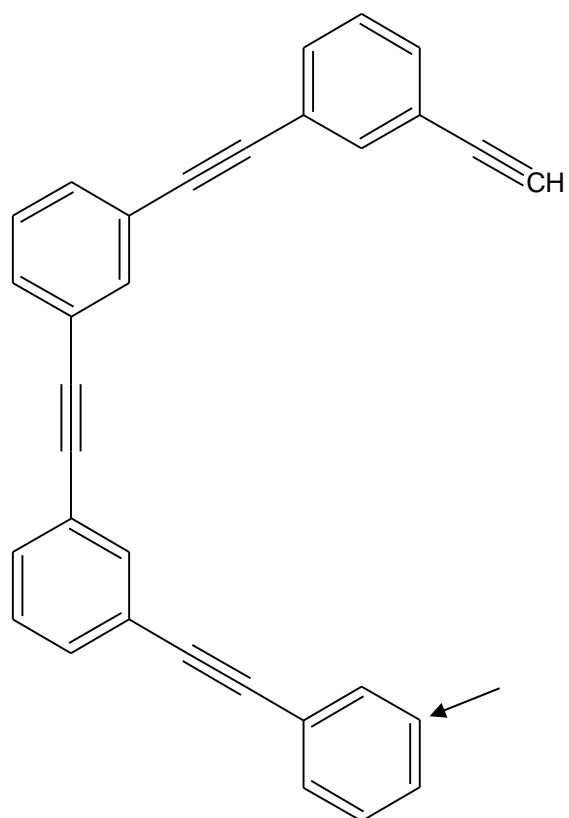
2. Także z tabeli rodników wybieramy *etynyl* (znajdziemy go w kategorii *C-Groups*) i dołączmy do do atomu wskazanego przez strzałkę powyżej.



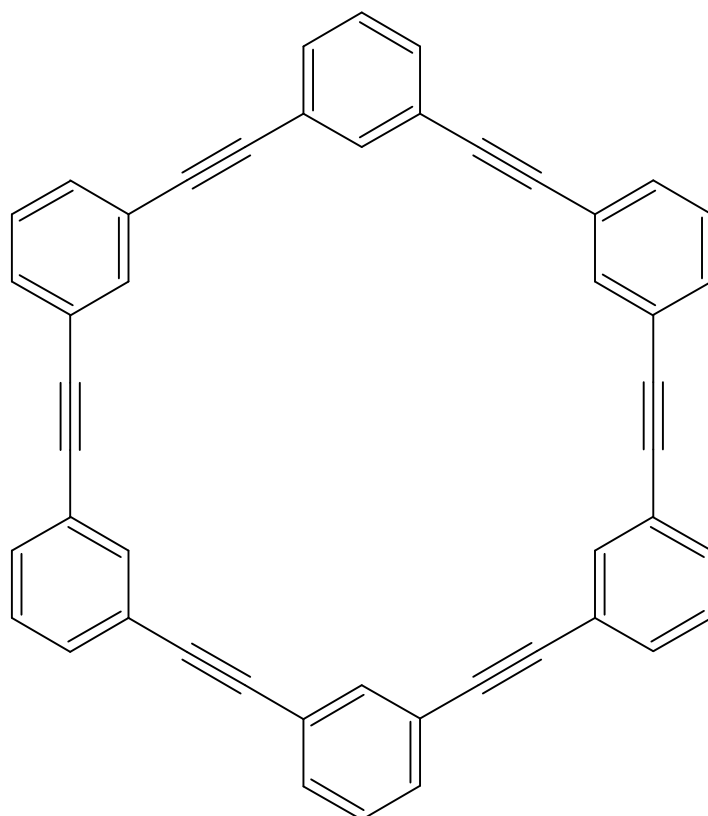
3. Naciskamy przycisk *Instant Template*  (obok *Clean Structure*) i klikamy w atom wskazany przez strzałkę 1.
4. Tak utworzoną kopię dołączamy do atomu wskazanego przez strzałkę 2.



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



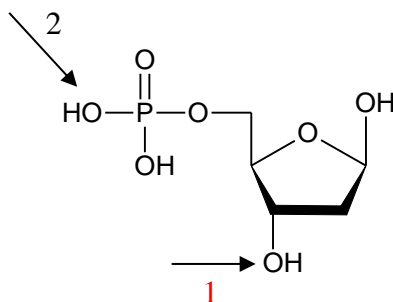
6. Ten sam fragment doczepiamy w miejscu oznaczonym powyżej strzałką. **Ostatnie wiązanie między grupą CH a pierścieniem benzenu należy utworzyć po przejściu do trybu *Draw Normal*.**



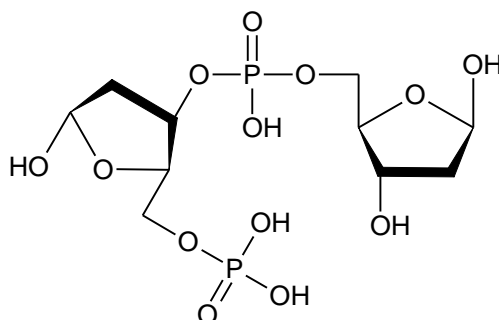
Fragment DNA

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

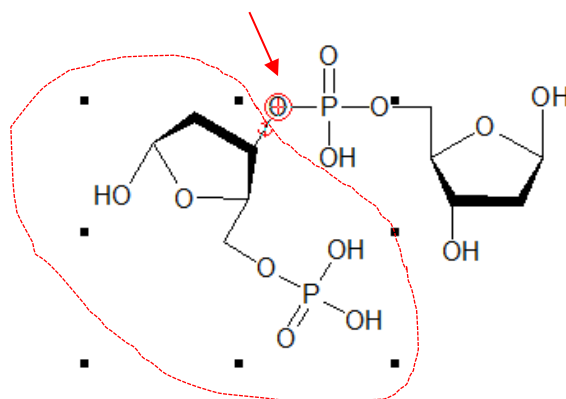
1. Wybierzmy lewą strukturę *2-Deoxyribose-5-phosphate*, klikając w oknie *szablonów* czubkiem kursora myszy **we wskazy strzałką nr 1 atom** (będzie to punkt łączenia!).



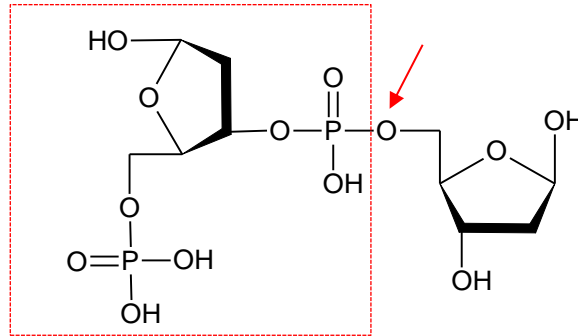
2. Umieściwszy kursor nad atomem wskazanym strzałką 2, kliknij (**wciskając jednocześnie klawisz Shift**), żeby dołączyć kolejny fragment *2-deoxyribose-5-phosphate*.



3. Po wybraniu narzędzia *Select/Rotate/Resize* obrysowujemy lassem całą drugą (dołączoną) cząsteczkę, ustawiamy **środek obrotu (czerwone kółko z krzyżykiem)** na wskazanym strzałką atomie O i łapiąc kursorem myszy za jakikolwiek zaznaczony atom obracamy zaznaczony fragment zgodnie z ruchem wskazówek zegara.

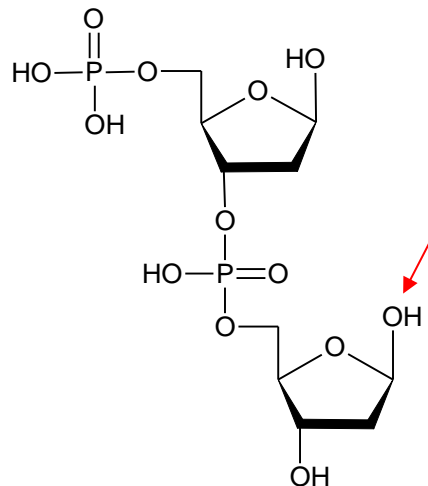


4. Otrzymamy:

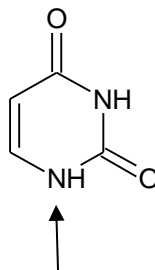


5. Zaznacz ponownie część struktury, obejmując ją tym razem prostokątnym lassem. Następnie przenieś **środek obrotu** na atom tlenu (strzałka na rys. powyżej) i **wciskając Shift** uchwycić dowolny atom wewnątrz prostokąta i obróć zaznaczony fragment o 90 stopni w kierunku zgodnym z ruchem wskazówek zegara.

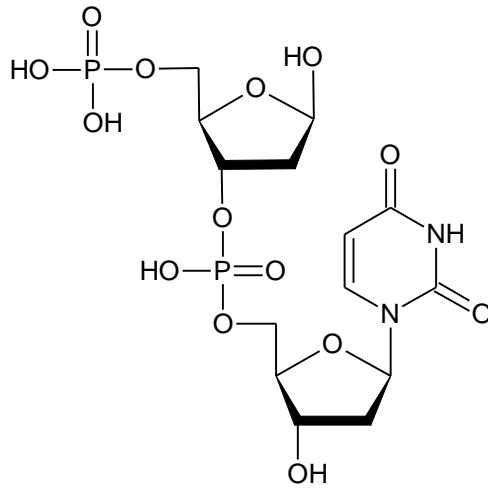
Otrzymasz:



6. Dołączymy teraz do powyższej molekuly kolejny element. W oknie szablonów wybieramy (DNA/RNA) uracil, klikając we wskazany czarną strzałką atom azotu, który będzie wykorzystany jako **punkt przyłączenia**.

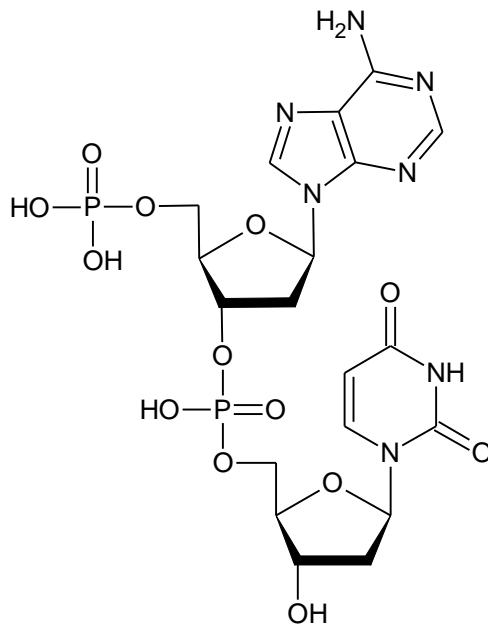


Przytrzymując klawisz Shift dołączamy *uracil* do grupy OH wskazanej czerwoną strzałką na rysunku powyżej. Dostaniemy:



Sprawdź jaki byłby efekt łączenia bez wciśniętego klawisza Shift!

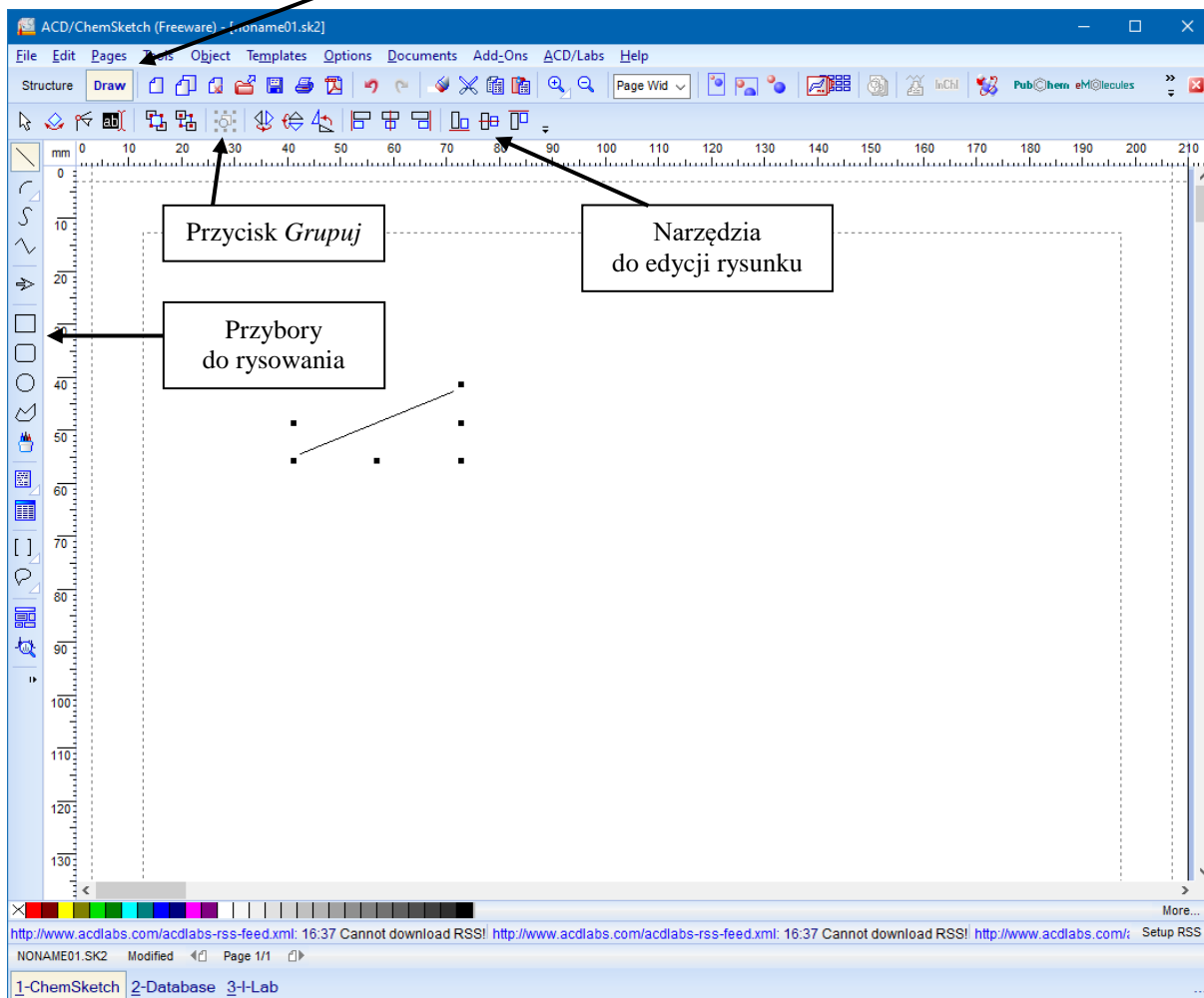
7. Postępując w analogiczny sposób wybierz właściwe punkty łączenia i spróbuj dodać do cząsteczki *adeninę*, tak aby uzyskać następującą strukturę:



Tryb Draw

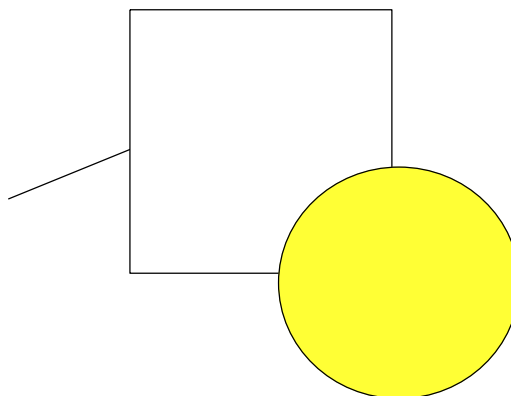
Rysowanie aparatu do destylacji próżniowej

Po kliknięciu przycisku *Draw* okno programu zmienia swój wygląd:



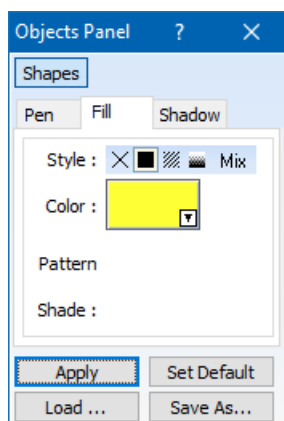
Pojawiły się nowe paski narzędzi (wskazane na powyższym rysunku).

Narysuj kilka kształtów – linię, prostokąt, koło – tak, aby zachodziły na siebie:



Sprawdź działanie wszystkich narzędzi z paska na górze. Aby zgrupować obiekty należy najpierw zaznaczyć kilka z nich z wciśniętym klawiszem *Shift*.

Aby zmienić kolor tła koła kliknij dwukrotnie w jego krawędź i przejdź do zakładki *Fill* okna *Object Panel*, które się wtedy wyświetli:

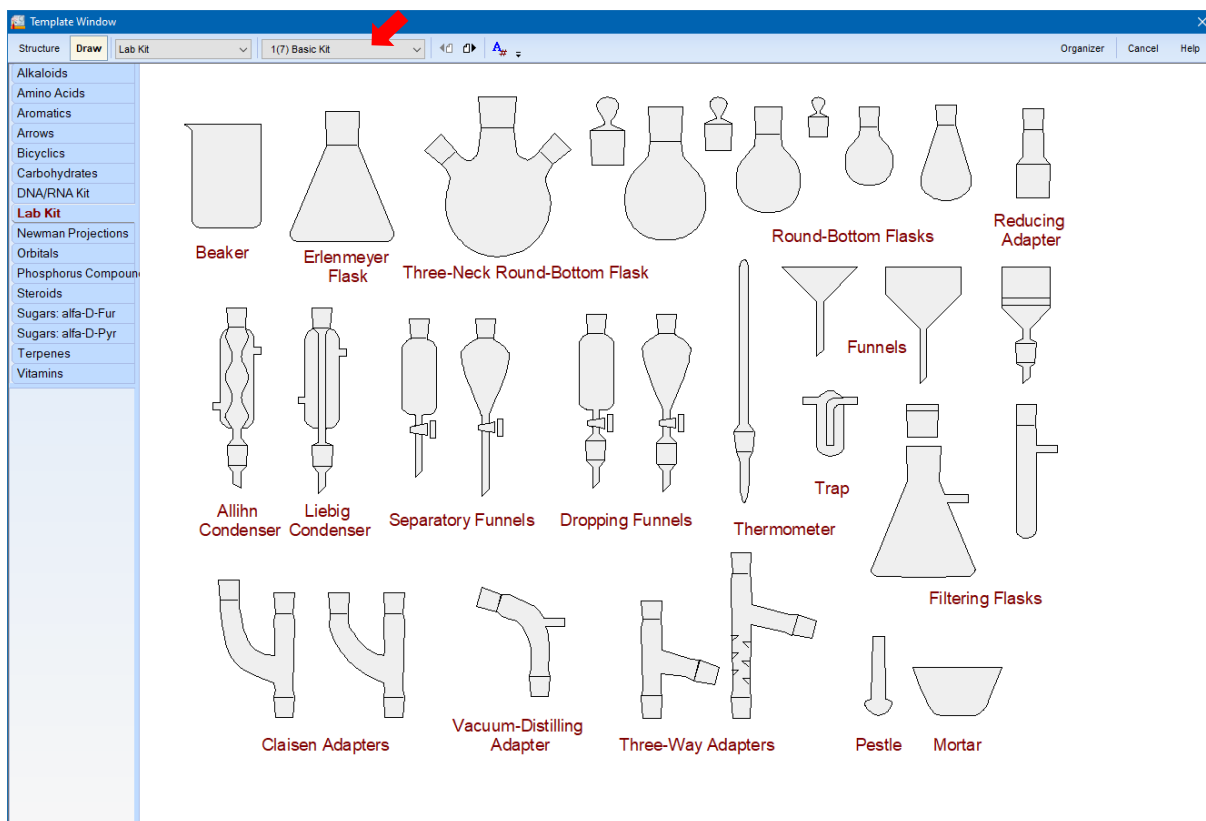


W ten sposób można modyfikować wygląd każdego z kształtów.

Wykorzystamy teraz tryb *Draw* do wykonania schematu aparatury.

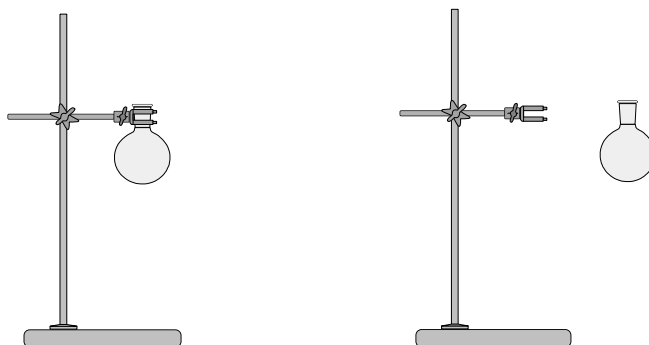
1. Będąc w trybie *Draw* ustawiamy *Zoom* na np. 100%
2. Klikamy ikonę *Template* i potem w *Lab Kit*.

Okno zawiera 7 kart, które wybieramy z listy rozwijanej:

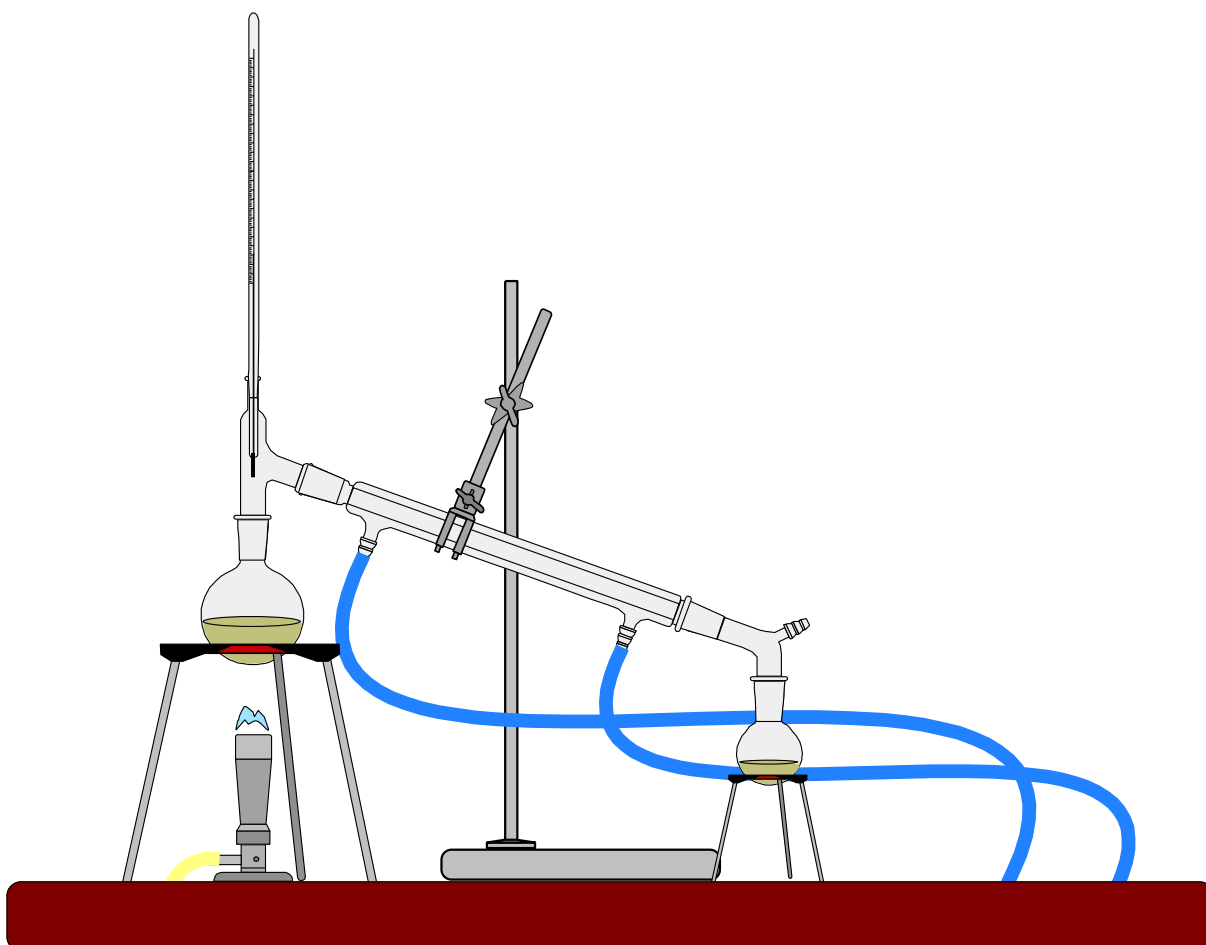


3. Poszczególne elementy połączymy, klikając w obszar roboczy. Naciśnięcie *prawego przycisku myszki* likwiduje *cień*. Każdy obiekt możemy obrócić o jakiś kąt używając narzędzia *Select/Move/Rotate*.

4. Ewentualne 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.
5. 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.:



6. Znajdź teraz w *Lab Kit* wszystkie potrzebne elementy i narysuj schemat aparatury do destylacji. Węże rysuje się używając narzędzia *Curve*. Po dwukrotnym kliknięciu można zmienić ich kolor i grubość. Narzędzie *Send to Back* schowa ich końce za blat.



Łączenie pracy w trybie *Structure* i *Draw*

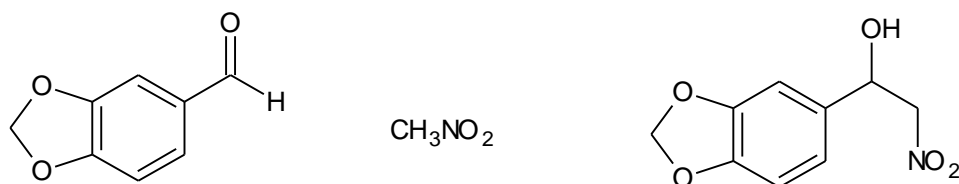
Równanie reakcji chemicznej ze wzorami strukturalnymi i sumarycznymi:

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

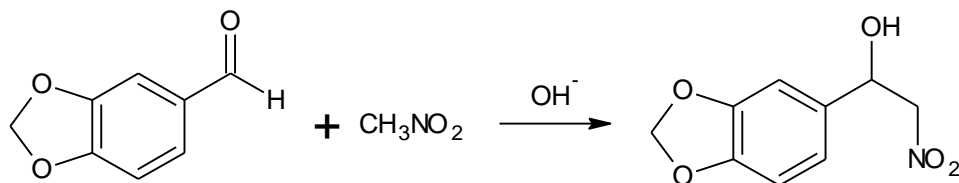


Wzór sumaryczny grupy NO₂ dodajemy używając *Edit Atom Label*.

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

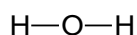


3. Dodaj jeszcze strzałkę reakcji, znak + oraz na strzałce wzór jonu OH⁻

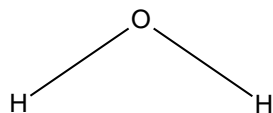


Wzór cząsteczki wody:

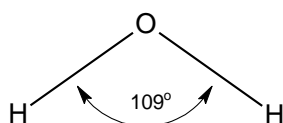
1. Wybierz atom tlenu i kliknij w obszar roboczy. Otrzymamy w ten sposób H₂O.
2. Z menu *Tools* wybierz *Add Explicite Hydrogens*:



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*):



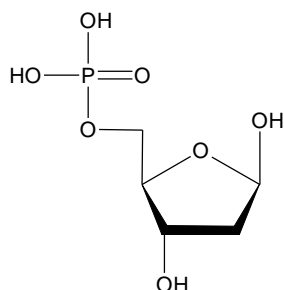
5. Na koniec dorysuj łuk zakończony strzałkami i dodaj etykietę z wartością kąta:



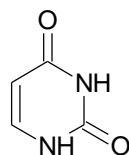
Style i szablony

Praca z różnymi stylami w trybie *Structure*.

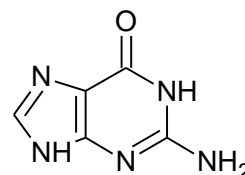
Narysujemy ponownie fragment DNA, wykorzystując do tego *DNA / RNA Kit* lub wykorzystamy wcześniej zbudowaną molekułę:



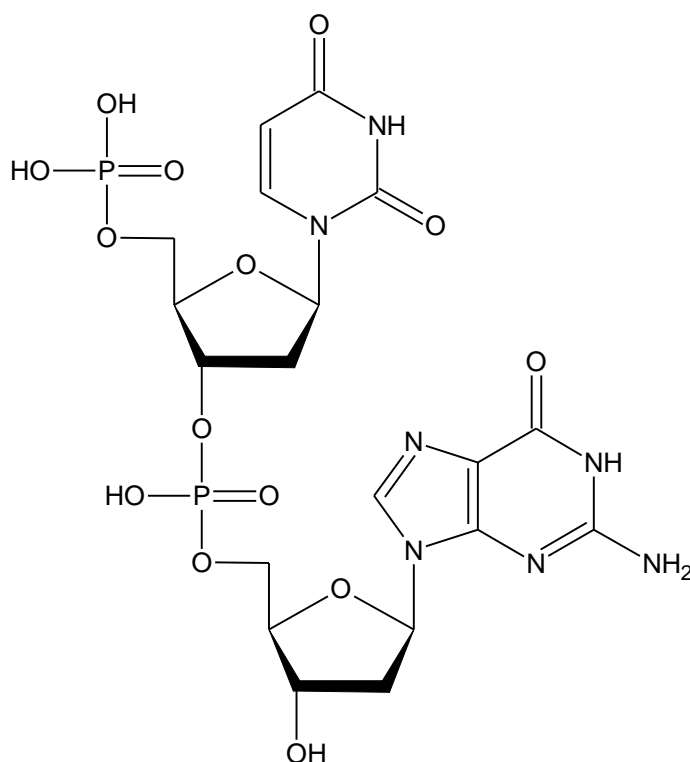
2-Deoxyribose-5-phosphate



Uracil



Guanine

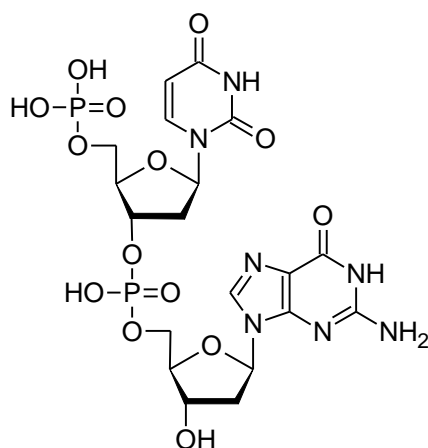


Pamiętajmy, że łącząc poszczególne elementy, należy używać kombinacji Shift + kliknięcie, gdyż wtedy nie tworzy się dodatkowych wiązań.

Założmy 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 (Ctrl+A).
2. Klikamy w nią dwa razy.

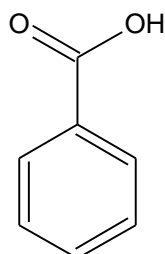
Otwiera się okno *Properties*. Rozwijamy menu znajdujące się tuż pod napisem tytułowy. Jest to spis stylów używanych w różnych czasopismach naukowych. Wybierzmy style, np.: *Eur. J. Org. Chem.* i zatwierdźmy wybór, naciskając przycisk *Apply* (zastosuj). Otrzymamy taki np. wygląd wzoru:



Sprawdzić inne style dostępne w programie, a potem **przywrócić styl domyślny (Normal)**.

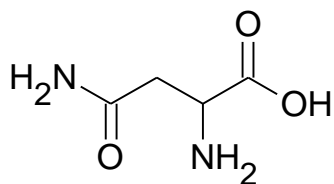
Obliczanie własności makroskopowych związków

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 rysujemy wzór chemiczny. 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. *fullereny* do okna szablonów zaznaczymy w organizatorze kartkę przy *Fullerens* i zatwierdzamy klikając OK.

Klikamy *Open Tempate Window*, aby sprawdzić czy nowa kategoria została dodana.