

Tastevejledning – ChemSketch 4.5 (del 1)

Indholdsfortegnelse

| | |
|--|----------|
| INSTALLATION | 3 |
| START AF CHEMSKETCH | 3 |
| TEGN DIT FØRSTE MOLEKYLE | 5 |
| MARKERING AF ELEMENTER PÅ ARBEJDSOMRÅDET | 5 |
| ÆNDRING AF STANDARDVISNING..... | 6 |
| LAV PROPAN TIL PROPAN-2-OL | 8 |
| ÆNDRING AF BINDINGSTYPE (DOBBELT- OG TRIPELBINDINGER)..... | 9 |
| RETTELSE I TEGNING..... | 10 |
| <i>Fjern enkelt atom</i> | 10 |
| <i>Fortryd</i> | 10 |
| <i>Ændring af atomsymbol</i> | 11 |
| <i>Tilføjelse af standard gruppe-benævnelser</i> | 12 |
| ANDRE TEGNEFUNKTIONER | 13 |
| <i>Tegn fortløbende (Draw Continuous)</i> | 13 |
| <i>Tegn kæde</i> | 14 |
| <i>Lav bindinger</i> | 14 |
| <i>Andre bindingstyper (stereo, koordinativ, udefineret)</i> | 14 |
| VÆRKTØJER TIL ORIENTERING AF MODEL (I)..... | 15 |
| VÆRKTØJER TIL ORIENTERING AF MODEL (II)..... | 17 |
| <i>Flyt hele modellen eller en deraf</i> | 18 |
| <i>Roter hele modellen eller en del deraf</i> | 18 |
| UDVÆLGELSE OG SKALERING | 19 |
| UDVÆLGELSE OG ROTATION | 19 |
| <i>Udvælgelse og kopiering</i> | 20 |
| 3D ROTATION | 21 |
| FUNKTIONER TIL ÆNDRING AF SIDEVISNING..... | 22 |
| KEMISKE VÆRKTØJER | 22 |
| <i>Check for tautomeri</i> | 22 |
| <i>Vis eller skjul symbol for aromatiske ringe</i> | 23 |
| <i>Skriv korte formler på udvidet form</i> | 23 |
| <i>Fjern eksplicit angivne H-atomer</i> | 24 |
| <i>Lav eller fjern nummerering af atomer</i> | 24 |
| <i>Manuel nummerering</i> | 25 |
| <i>Beregn molekylære egenskaber</i> | 25 |
| HENT OG GEM TEGNINGER OG MOLEKYLMODELLER..... | 26 |
| <i>Andre filformater</i> | 26 |

| | |
|--|-----------|
| UDSKRIFT | 28 |
| UDSKRIV PLAKAT | 28 |
| TEGNING AF MERE KOMPLICEREDE STRUKTURER (HÆM) | 29 |
| ARBEJDE MED LADNINGER | 34 |
| <i>Amino-gruppe</i> | 35 |
| <i>Methylradikal</i> | 35 |
| MERE OM SKABELONER | 35 |
| <i>Benzpyren</i> | 37 |
| <i>Maltose</i> | 38 |
| REAKTIONSSKEMAER MED MOLEKYLMODELLER..... | 41 |
| FRA 2D TIL 3D (I) | 41 |
| FRA 2D TIL 3D (II) | 42 |
| FUNKTIONSBJÆLKE TIL VINDUESSKIFT | 43 |
| VÆRKTØJSLINIEN I ACD/3D | 44 |
| INDSTILLINGER TIL ACD/3D | 44 |
| <i>Wireframe</i> | 44 |
| <i>Sticks</i> | 45 |
| <i>Balls and Sticks</i> | 45 |
| <i>Spacefill</i> | 46 |
| <i>Dots only</i> | 46 |
| <i>Disks</i> | 47 |
| <i>With Dots</i> | 47 |
| <i>Increase Atom's Radii by 5%</i> | 48 |
| <i>Decrease Atom's Radii by 5%</i> | 48 |
| <i>Calculate Distance between 2 Atoms</i> | 48 |
| <i>Calculate Angle between 2 Bonds</i> | 49 |
| <i>Calculate Torsion Angle</i> | 50 |
| <i>3D Optimization</i> | 50 |
| <i>Set Colors</i> | 51 |
| <i>Auto Rotate</i> | 51 |
| <i>Auto Rotate and Change Style</i> | 51 |

Installation

Installationsprogrammet til ChemSketch kan hentes hos Advanced Chemistry Development, Inc. på webadressen: <http://www.acdlabs.com/>

Den nedenfor beskrevne procedure er gyldig primo 2001.

I venstre side af skærbilledet vælges punktet "Free Stuff", herefter igen "ChemSketch 4.5 Freeware". Fra den næste side vælges linket et stykke nede på siden (Download ChemSketch 4.5 Freeware). Det fører til en registrerings-side, hvor der skal udfyldes forskellige informationer, før det egentlige download kan ske.

Efter et vellykket download har du et installationsprogram, Chems45.exe, der fylder 5,766 KB. Det startes ved et dobbeltklik. Installationen går i gang, og der skal besvares en række standardspørgsmål, der som regel kan klares med klik på "Næste" eller "OK".

Når det er overstået, er ChemSketch installeret på pc'en.

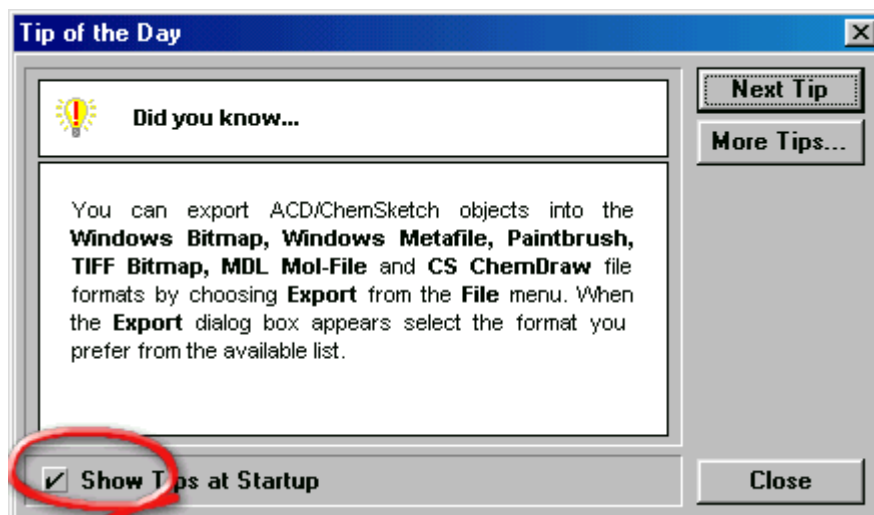
Start af ChemSketch

Programmet installerer sig således i Start – Programmer under ACDLabs FreeWare:

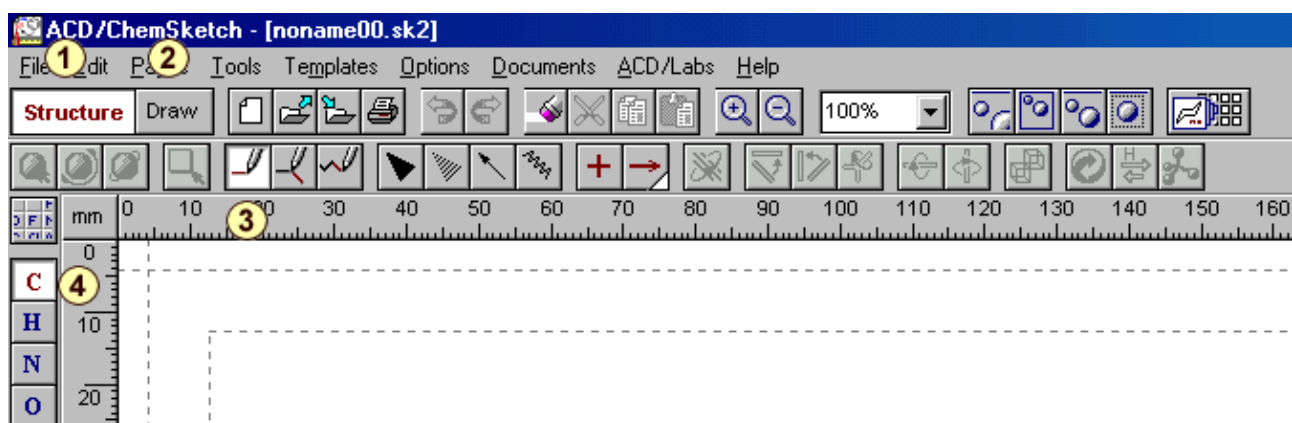


Det ses, at der faktisk installeres to programmer, idet et program til 3D-visning af tegnede molekylmodeller samtidig installeres. Mere om dette senere.

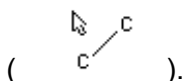
Ved start af ChemSketch afspilles en lille sekvens med reklamer for ACDLabs øvrige produkter. Sekvensen varer ca. 15 sekunder, men du kan afbryde den med tastekombinationen ALT-F4, eller du kan vente til knappen Cancel bliver aktiv. Derefter ser du "dagens tip". Du kan slå dette fra ved at fjerne fluebenet nederst til venstre i vinduet.



ChemSketch er nu klar til brug med et tomt arbejdsområde (dokumentvindue). Allerførst skal man bemærke, at der er to fundamentalt forskellige funktionsmåder **Structure** og **Draw** (knapperne til skift mellem dem er markeret med **1** hhv. **2** på figuren nedenfor).



Structure er valgt som standard ved start. Det er denne i funktionsmåde, der kan tegnes molekylmodeller. Værktøjet til at tegne normale bindinger er valgt (**3**) og atomet for enderne af en binding er valgt til carbon (**4**). Markøren afspejler dette, idet den inde på arbejdsområdet symboliserer en C-C-binding



Vælges **Draw**, åbnes der for et tegneprogram på den samme side. Dette vises ved at værktøjsknappe i 2. linie skiftes ud, og ved at der vises tegneværktøjer til venstre for arbejdsområdet i stedet for atomsymboler. Molekylmodeller, der måtte befinde sig på siden, bliver til objekter i tegneprogrammets betydning, og de kan behandles med tegneprogrammets redskaber. Mere om det i Del 2.

Tip: Der kan skiftes mellem de to funktionsmåder med mellemrumstasten.

Tegn dit første molekyle

Brug "Tool Tips" som hjælp til at finde ud af funktionen for en knap i værktøjslinien. Lad musen hvile på den pågældende knap, og der vil komme en sort tekst på gul baggrund, der giver et stikord til knappens funktion. Prøv det fx med knappen

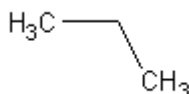
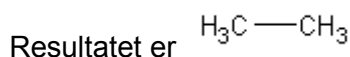


til normale bindinger ("Draw Normal")

1. Kontroller at Structure-knappen er trykket ind.
2. Vælg Draw Normal, hvis ikke allerede valgt.
3. Klik et sted i arbejdsområdet med musen.
Du får et C-atom, hvor der er fyldt det nødvendige antal H-atomer på:



4. Klik inden for rektanglet, der tegnes om CH₄, når markøren føres ind over symbolet.



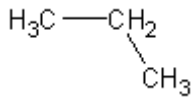
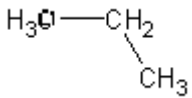
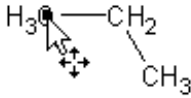
5. Klik igen i et af "molekylets" ender. Du får et propanmolekyle tegnet på den normale, kondenserede måde, hvor C-atomer med tilhørende H-atomer inde i en kæde blot angives ved et knæk på carbonkæden.

Markering af elementer på arbejdsområdet

En lang række funktioner i ChemSketch kan enten ske på hele modellen eller på dele deraf, som så skal vælges eller markeres. For at få adgang til markeringsværktøjet skal du klikke på knappen yderst til venstre på værktøjslinien:



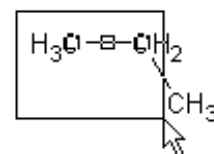
Markøren skifter til en "normal" markør inde i arbejdsområdet. Klik på et atomsymbol. Det forsynes med en lille kasse som tegn på, at det er markeret ("Select"-markering). Hvis musen føres ind over det markerede atomsymbol, bliver den lille kasse fyldt ud, og markøren skifter til "Move"-visning som tegn på, at du kan flytte det markerede uafhængigt af resten af modellen.

| | | |
|---|---|---|
|  |  |  |
| Propanmolekyle | Øverste venstre C-atom markeret | Klar til at flytte C-atomet |

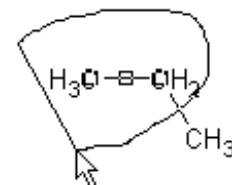
For at markere flere elementer i modellen skal du holde SHIFT-tasten nede, mens du klikker eller bruger Select-værktøjet (se nedenfor) på dem.

Du kan også markere bindinger. De to atomer for bindingens ender bliver automatisk valgt, når du vælger en binding. Tilsvarende bliver en binding valgt, hvis du vælger atomerne for bindingens ender.



Når du har Select-værktøjet aktivt, kan du bruge musen til at "trække" en markering rundt om det ønskede. Som standard er der valgt "markering med kasse". Her får du trukket den normale Windows-kasse (rektangel) rundt om den del af tegningen, som du markerer ved at trække diagonalt fra hjørne til hjørne.



Ved lidt mere komplicerede molekylmodeller er det ikke altid muligt, at lægge en kasse ind, der markerer det ønskede. ChemSketch har en anden udgave af markeringsværktøjet, der kaldes en "Lasso". Markering af de samme atomer som ovenfor med Lasso-værktøjet er vist her.



Lasso eller kasse skiftes med tryk på knappen

| | |
|---|--|
|  |  |
| Markering med kasse-selektor | Markering med Lasso-selektor |


For hurtigt valg af alle elementer i arbejdsområdet kan du bruge Windows-standarden Edit – Select All fra menuen eller bruge genvejstasten: CTRL + A.

Du kan også klikke på et tomt sted i arbejdsområdet, hvis du allerede har valgt noget i arbejdsområdet, så slettes markeringen, så intet er valgt. Klikker du én gang til, så vælges alt i arbejdsområdet.

Ændring af standardvisning

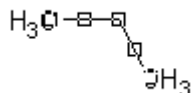
Hvis du gerne vil have ChemSketch til at vise alle atomer eksplicit, så er opskriften hertil

1. Brug markerings-værktøjet til at markere hele molekylet (træk en kasse

eller en lasso udenom) . Du kan også blot klikke en enkelt gang i arbejdsområdet.

Du kan også vælge Edit – Select All fra menuen eller bruge genvejstasten: CTRL + A

2. Modellen forsynes med markeringsmærker som tegn på, at den er valgt:



3. Fra menuen vælges:

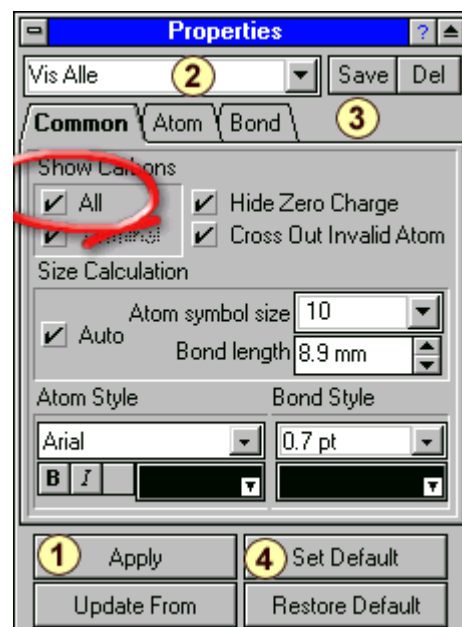
Tools – Structure Properties

Du kan også føre musen ind over det markerede, så de små markeringer skifter til sort, og dobbeltklikke

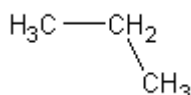


4. For at få vist alle modellens carbonatomer med atomsymbol skal du sætte et flueben i boksen All under Show Carbons som vist i det indrammede. Boksen har tre tilstande. Lys grå, hvor funktionen er slået fra; mørk grå, hvor funktionen gælder for nogle af tegningens atomer, og den ønskede lys grå med flueben, der gælder for alle markerede atomer.

Vælger du  i bunden af Properties-vinduet, så bruges den nye indstilling på det markerede – og kun dette.




5. Et klik på Apply-knappen giver denne nye re-




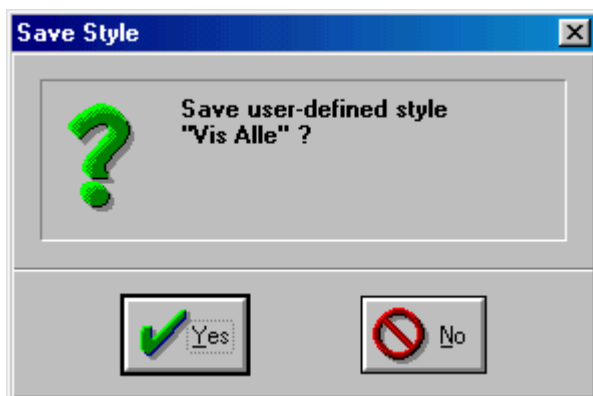
præsentation

6. Hvis du gerne vil have denne indstilling til at gælde hver gang, der tegnes i ChemSketch, så lav en ny skabelon ("Style"). Skriv et navn i linien

øverst, fx "Vis Alle" ()

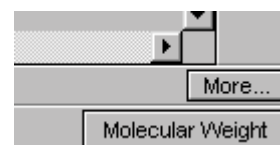
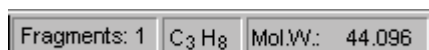


7. Klik på Save-knappen () og svar bekræftende på dialogboksen "Save Style"



8. Klik derefter på knappen Set Default (4 Set Default), for at gøre den valgte indstilling til din standardindstilling

Bemærk, at medens du konstruerer modellen, så vises løbende i statuslinien *antallet af fragmente, molekylformel* for vinduets molekyler eller molekylfragmenter samt den *molare masse*. Hvis du markerer dele af arbejdsområdets modeller, så gælder visningen for det markerede.

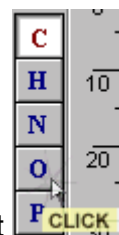


Med knappen Molecular Weight i nederste højre hjørne af ChemSketch-vinduet kan der vælges andre størrelser til visning i statuslinien i stedet for den molare masse.

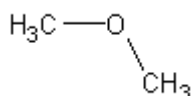
Her er den mest interessante nok Composition, der viser masse-% for modellens atomer.

Lav propan til propan-2-ol

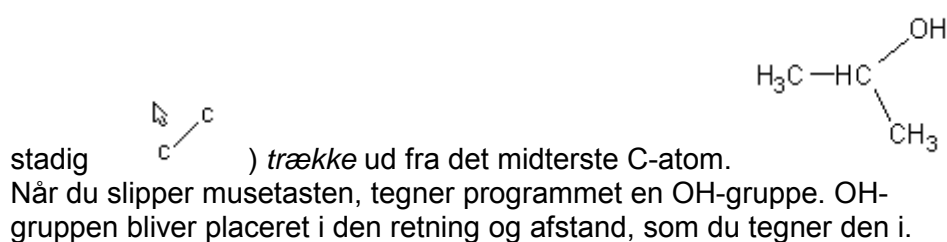
1. Sørg for, at du kun har modellen af propanmolekylet i arbejdsområdet, at du har Structure-knappen trykket ind, og at du har valgt Draw Normal



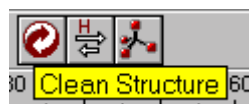
2. Vælg oxygenatomet i listen til venstre for arbejdsområdet
3. Gør det ikke! Men hvis du blot klikker på det midterste C-atom i propanmodellen, så får du en dimethylether. C-atomet laves om til et O-atom.



For at få propan-2-ol skal du med O-atomet valgt (markøren viser dog



4. Du kan få modellen standardiseret ("renset") via Clean Structure-knappen til højre på værktøjslinien (Knappen er forsynet med et "genbrugs-symbol")



Det giver en struktur, der minder meget om den ovenstående.

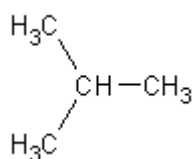
5. Flyt rundt på H-atomet på det midterste C-atom med "Change Position" værktøjet midt på værktøjslinien



Klik på det, så det er valgt, og klik derpå på den midterste CH-gruppe flere gange. Observer, hvorledes H-atomet skifter mellem 4 forskellige positioner. Change Position-værktøjet er meget nyttigt til en sidste finish af molekymodeller.

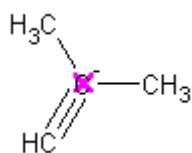
Ændring af bindingstype (dobbel- og tripelbindinger)

1. I arbejdsområdet tegnes 2-methylpropan:



(Du skal have Structure-knappen trykket ind og have valgt Draw Normal)

2. Klik på én af modellens bindinger med musen. Bindingen forsynes med en lille kasse, når musen føres ind over den
3. Ét klik skifter fra en enkeltbinding til en dobbeltbinding, idet antallet af H-atomer samtidig justeres
4. Klik én gang til. Forsøget på at lave for mange bindinger til det centrale C-atom markeres af programmet med et lilla kryds over atomet med ukorrekt bindingsantal



5. Klik igen for at vende tilbage til udgangspunktet. Bindingstypen ændres cyklisk i sekvensen enkelt – dobbelt – tripel

Hvis du af en eller anden grund ikke ønsker markering af atomer med ukorrekt bindingsantal, kan markeringen fjernes ved at fjerne fluebenet ud for "Cross Out Invalid Atom" i vinduet Tools – Properties

| Properties | |
|--|--|
| Normal | Save Del |
| Common Atom Bond | |
| Show Carbons | |
| <input checked="" type="checkbox"/> All | <input checked="" type="checkbox"/> Hide Zero Charge |
| <input checked="" type="checkbox"/> Terminal | <input checked="" type="checkbox"/> Cross Out Invalid Atom |
| Size Calculation | |

Rettelser i tegning

Der er flere muligheder for at lave rettelser til en tegnet model.

Fjern enkelt atom

Enkelte forkerte eller forkert anbragte atomer kan fjernes med "viskelæderet":



Vælg værktøjet og klik på det atom, der skal fjernes. Bemærk at markøren skifter udseende til en pil med teksten DEL:




Fjerner du et atom inde i en kæde eller i et forgreningspunkt, så vil programmet også fjerne alle små fragmenter, der ellers ville blive dannet.

Du kan også slette et atom med Delete-tasten, hvis du først markerer det. Markering af atomer (eller andre elementer i arbejdsområdet) sker med Select-værktøjet.

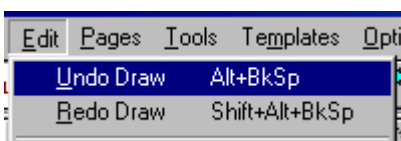
Fortryd

Hvis du under tegning af en model har fået lavet noget forkert, kan du anvende Fortryd-værktøjet til trinvis at gå baglæns gennem de seneste ændringer af teg-

ningen. Der kan fortrydes op til 50 skridt. Du finder Fortryd-værktøjet  i øverste værktøjslinje sammen med Gendan-værktøjet, der aktiveres første gang Fortryd er blevet brugt





De to funktioner kan selvfølgelig også bruges fra programmets Edit-menu, hvor du også finder genvejstasterne til funktionerne:



Ændring af atomsymbol

En lidt mindre omfattende rettelse er ændring af et atomsymbol i modellen. Som nævnt tidligere, kan du vælge et aktivt atom fra paletten til venstre for arbejdsområdet.

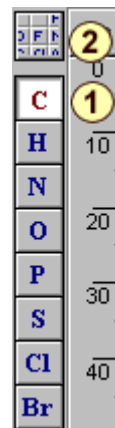
Som standard er C-atomet valgt () på figuren. Desuden vises syv af de almindeligst forekommende øvrige atomer i organiske molekyler. Hvis du har brug for andre atomer end de viste, så er der fra knappen markeret

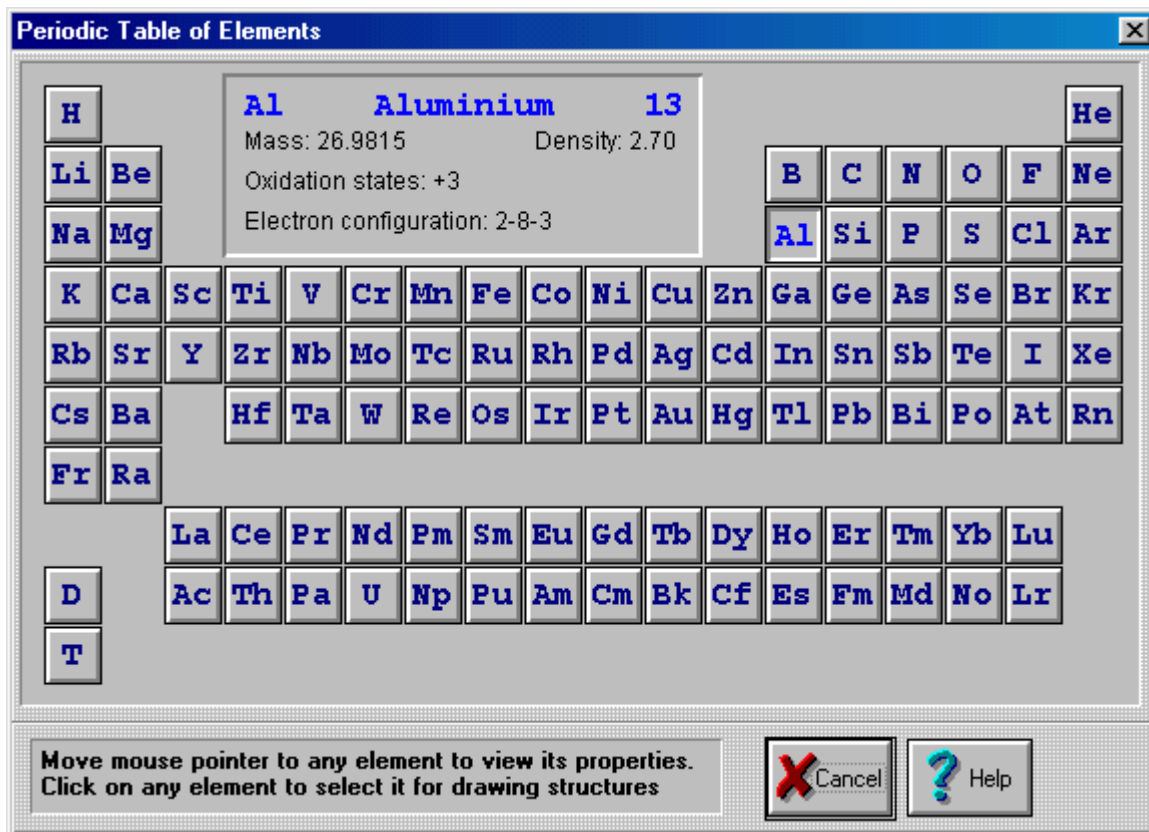
med  adgang til et *periodisk system*, hvor du kan vælge det atomsymbol, der indsættes ved klik (eller træk – klik) i arbejdsområdet.

Når det periodiske system vises, kan du i et vindue se data om det grundstof, som musen aktuelt peger på.

Nedenfor vises vinduet med aluminium valgt. Bemærk at for de metalliske grundstoffer angives "Oxidation states", medens der for ikke-metallerne tilsvarende angives "Valence"

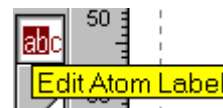
De første fire atomer, der vælges yderligere fra periode-systemet, tilføjes under paletten ude til venstre. Vælges flere, overskrives de ekstra atomer ovenfra. Skulle du ønske at fjerne de tilføjede atomsymboler, så kan du dobbeltklikke på et af de nye atomsymboler eller blot et sted i paletten, og så svare ja til spørgsmålet. "Remove user-selected 'Atom' buttons?"



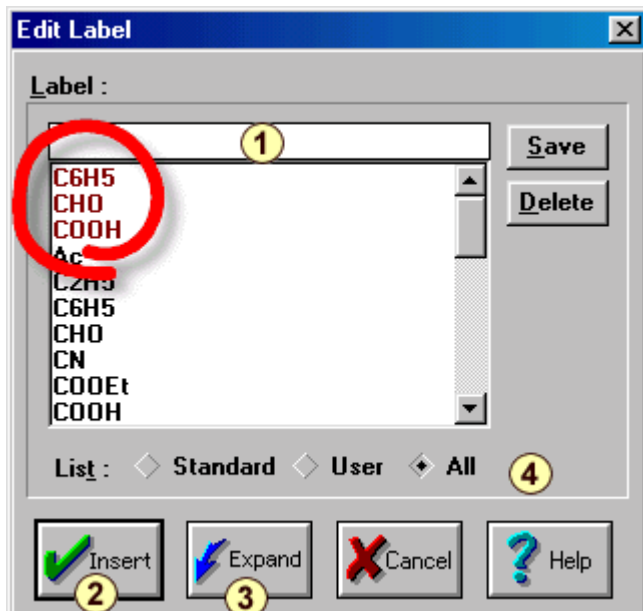


Tilføjelse af standard gruppe-benævnelser

Ønsker du at skrive strukturformler med brug af standardnavne for grupper, som fx $-\text{COOH}$, $-\text{C}_6\text{H}_5$ el. lign., så bruger du værktøjet "Edit Atom Label" fra paletten til venstre for arbejdsområdet. Markøren skifter til




Når du efterfølgende klikker på et (endestillet) atom i modellen får du denne dialogboks:




Du kan enten skrive din egen gruppe i indtastningsfeltet

(1) eller vælge fra listen. Indtaster du en ny gruppe, kan du vælge at gemme den til senere brug med Save-knappen. I toppen af listen (indcirklet) findes de grupper, der har været brugt i den aktuelle session med programmet.



Knappen Insert  gør selvfølgelig lige det, som navnet siger. Den indsætter den skrevne eller valgte gruppe der, hvor du kikkede i modellen.



Knappen Expand ved siden af  indsætter en ekspanderet version af gruppen. Alle Standard-grupper kan ekspanderes, medens der er (naturlige) begrænsninger på egne grupper.

Hvis det ønskes, kan du vælge, om du vil se programmets (Standard), egne (User) eller alle (All) grupper ved en markering i linien over knapperne



Bemærk, at tal skrives på linien i indtastningsfeltet, men indsættes som korrekte indices på tegningen.

Værktøjets brug i punktform

1. Vælg "Edit Atom Label"-værktøjet til venstre for arbejdsområdet
2. Klik med den ændrede markør på det sted, hvor der skal indsættes en gruppe-forkortelse
3. Skriv eller vælg den ønskede gruppe
4. Klik på Insert-knappen for at indsætte gruppen som skrevet, eller kig på Expand for at indsætte som ekspanderet struktur

Andre tegnefunktioner

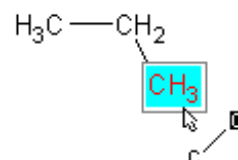
Tegn fortløbende (Draw Continuous)



Med dette værktøj kan der kun tegnes fra et markeret atom:

Du kan således ikke erstatte et atom med et andet ved at klikke på det. Funktionsmåden er meget bekvem, når der skal tegnes nye atomer, der udgår fra et andet atom.

Markøren ligner den fra den normale tegnefunktion, men det øverste lille C-atom er vist fremhævet for at minde om redskabets virkemåde.



På figuren er vist et propanmolekyle, hvor der med dette værktøj er klikket på CH₃-gruppen, så den er blevet markeret (valgt). Ved næste klik vil der blive tegnet et atom (eller en gruppe), der bliver bundet til det valgte atom.

Tip: Du kan hurtigt skifte mellem Draw Normal og Draw Continuous med et høj-

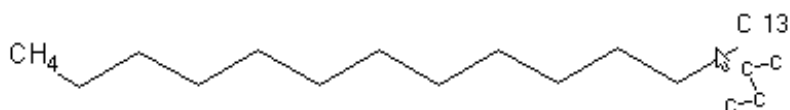
reklik i arbejdsområdet.

Tegn kæde

Skal der tegnes lange carbonkæder, så er dette værktøj.

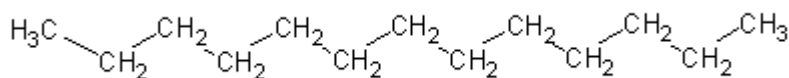


Når venstre musetast holdes nede, og musen trækkes hen over arbejdsområdet, vil der tegnes en zig-zag kæde. Antallet af C-atomer i kæden vises løbende.




Sådan ser det ud, medens der trækkes med musen. Bemærk markørens udseende og visning af antallet af C-atomer.


Når musetasten slippes, vises strukturen (her er valgt, at alle C-atomer skal vises)




Tip: Højreklik i arbejdsområdet, når kædeværktøjet er valgt, skifter til almindelig tegning (Draw Normal).

Lav bindinger

Hvis du har flere fragmenter, der skal bindes sammen, eller hvis der skal laves en cyklisk struktur, hvor et atom i den ene del af modellen skal bindes til et atom andetsteds i modellen, så kan dette gøres med det normale tegneværktøj (

Draw Normal) eller det fortløbende tegneværktøj ( Draw Continuous)

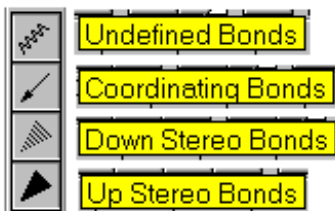
Klik på atomet i den ene ende af den nye binding og træk med musen til atomet, der skal bindes. ChemSketch laver bindingen. Den nye binding kan ofte se meget anderledes ud end modellens øvrige bindinger, men det kan klares ved at

”rense” modellen med Rens-værktøjet ( Clean Structure). Vær opmærksom på, at *alle* modellens bindinger får længde og retning efter programmets prædefinerede regelsæt.

Andre bindingstyper (stereo, koordinativ, udefineret)

ChemSketch har fire andre bindinger til rådighed (her vist drejet i forhold til værktøjet)

tøjslinien):






Fra højre mod venstre på værktøjslinien

1. Udefinerede bindinger, der markeres med en tæt zig-zag linie.
2. Koordinative bindinger, hvor det ene atom leverer det fælles elektronpar i bindingen
3. Stereo-binding, der er *ind i papiret*, og som tegnes *stiplet*.
4. Stereo-binding, der er *ud af papiret*, og som tegnes *udfyldt*.

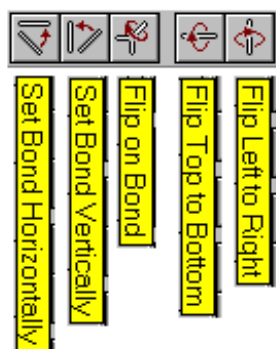
For alle disse bindinger gælder, at du kan skifte udfyldningsform for bindingen ved gentagne klik på samme binding. (Den udefinerede binding har selvfølgelig ingen retning, men den skifter fra "zig-zag" til "zag-zig").

Værktøjer til orientering af model (I)

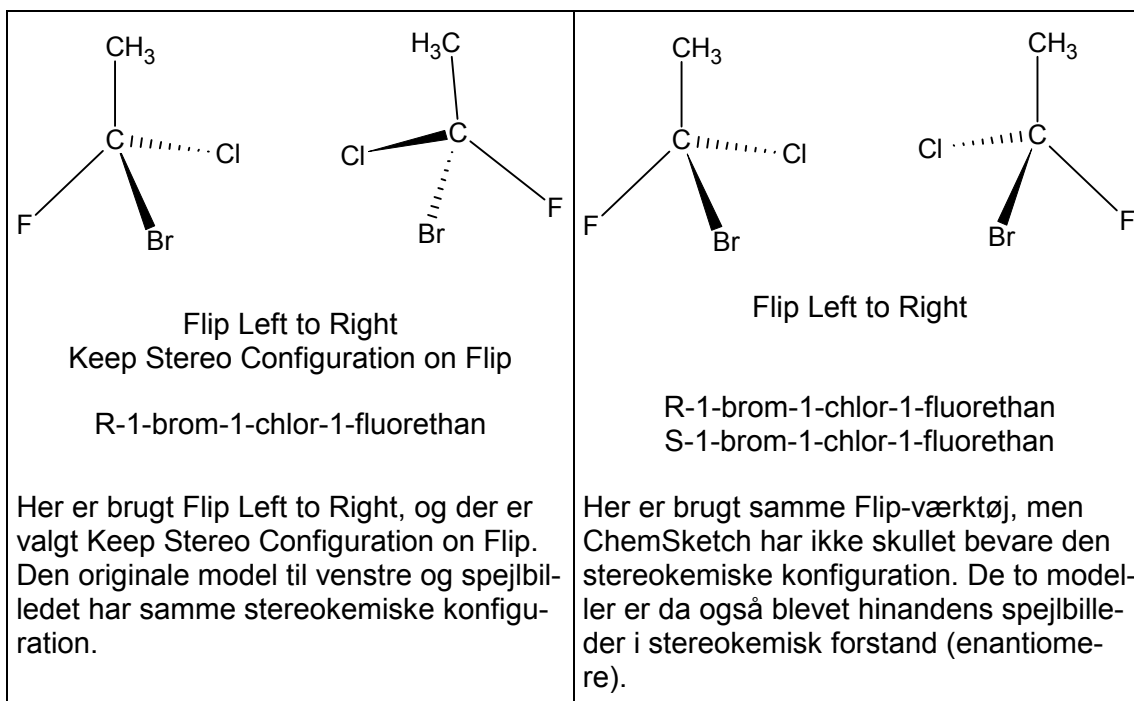
På værktøjslinien findes nogle redskaber til orientering af modellen.

1. En valgt binding kan orienteres vandret eller lodret. Resten af modellen drejer med. 
2. Modellen kan roteres ("flippes") om en valgt binding. Bindingen bliver liggende i arbejdsområdets plan. 
3. Modellen kan spejles om en vandret eller lodret plan. Hvis der er valgt en del af strukturen, er det kun denne, der spejles. Hvis der ikke er valgt noget, spejles alt på siden. 

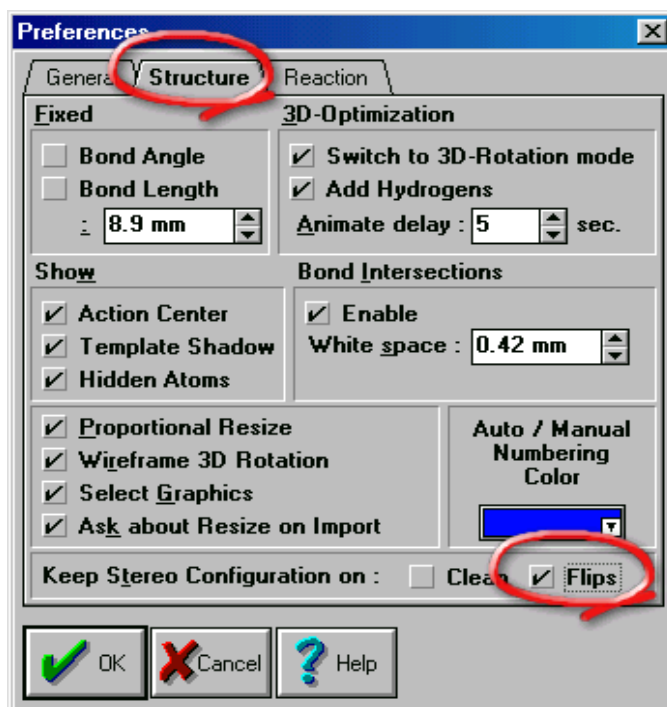
Her er de fem værktøjer til drejning og spejling vist med deres "Tool Tips". Ved brug af de tre Flip-værktøjer, skal du være opmærksom på, at det kan ændre en molekylmodells stereokemiske forhold.



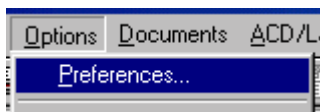
Nedenfor er vist originalmodellen og den spejlede model ("Flip Left to Right"). Hvis du i en model bruger de stereokemiske bindinger (Op- og Ned-bindingerne), så kan ChemSketch stilles til at tage højde for disse bindingers forhold ved Flip-operationer.



Bemærk her, at ChemSketch opfatter en udfyldt stereobinding som pegende *op* fra papiret uanset hvilken vej bindingen er vist kileformet. Hvis Keep Stereo Configuration on Flip er valgt, vil ChemSketch ombytte *op*-bindinger med *ned*-bindinger ved Flip-operationer.



Hvis du vil ændre ChemSketch's håndtering af de stereokemiske forhold ved Flip-operationer, så skal det gøres fra menupunktet Options – Preferences



Du får vinduet vist ovenfor. Heri vælger du fanebladet Structure

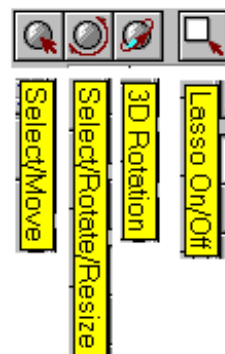
I bunden af vinduet sætter eller sletter du et flueben for den ønskede funktionsmåde.

Værktøjer til orientering af model (II)

ChemSketch tilbyder en række andre værktøjer til at ændre en models placering og orientering i arbejdsområdet.

Flyt hele modellen eller en deraf

Vælg markeringsværktøjet og afmærk en del af en model. Som eksempel flyttes de to øverste C-atomer i 2-methylpentan.

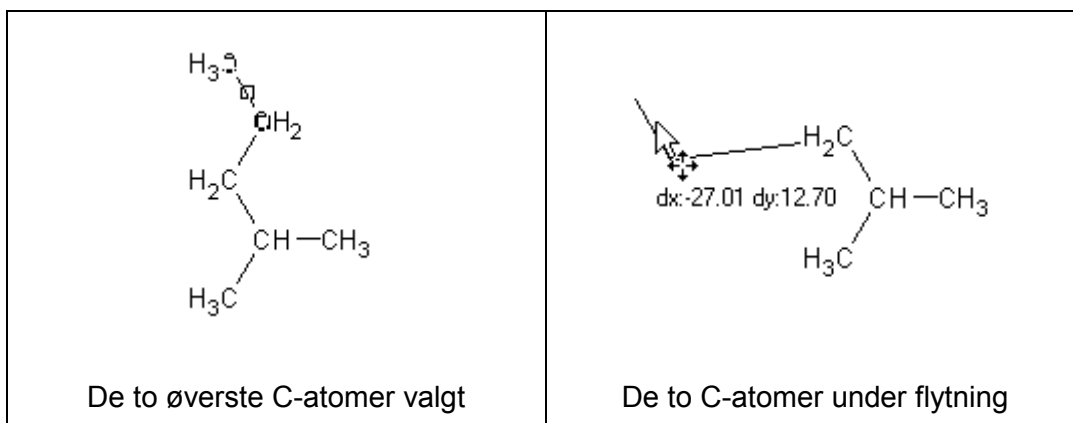


1. Marker atomerne (med kasse eller lasso)
2. Før musen ind over det markerede, så de små kasser bliver sorte
3. Hold venstre musetast nede og træk det markerede til ønsket placering. Holdes SHIFT-tasten nede, medens der trækkes flyttes enten kun i vandret retning eller kun i lodret retning
4. Du kan også flytte med tastaturets pile

Bemærk: Medens der flyttes, vises flytningens størrelse i x- og y-retningerne (dx og dy).


Bindinger i det markerede bevarer deres oprindelige orientering

Der bevares en "elastisk" binding mellem de to dele af modellen



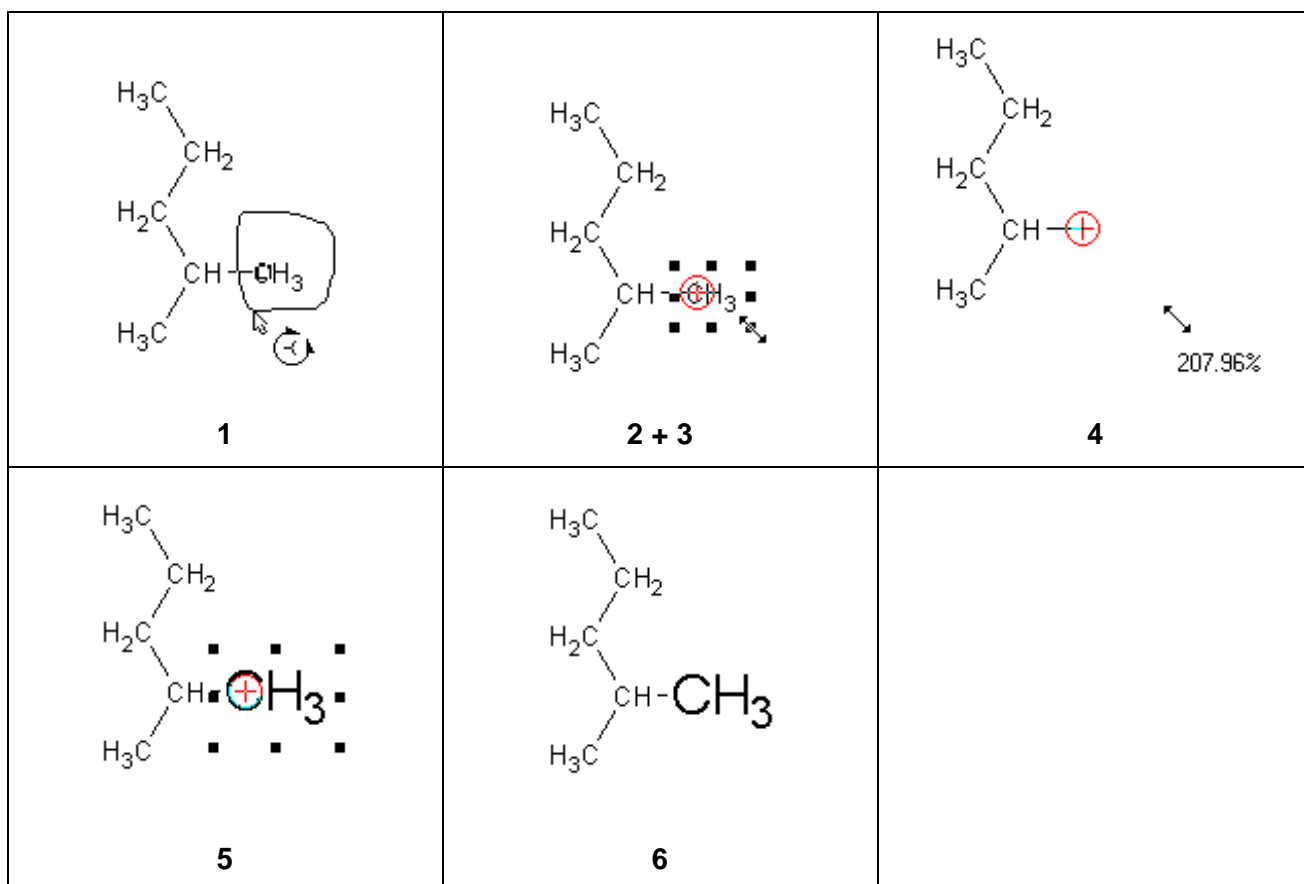
Vælges hele modellen, kan den flyttes som en enhed (translation i planen).

Roter hele modellen eller en del deraf

Rotationsværktøjet  har flere funktioner. Det kan bruges til udvælgelse (med lasso eller kasse). Derefter kan det valgte roteres i planen, eller det kan skaleres.

Udvælgelse og skalering

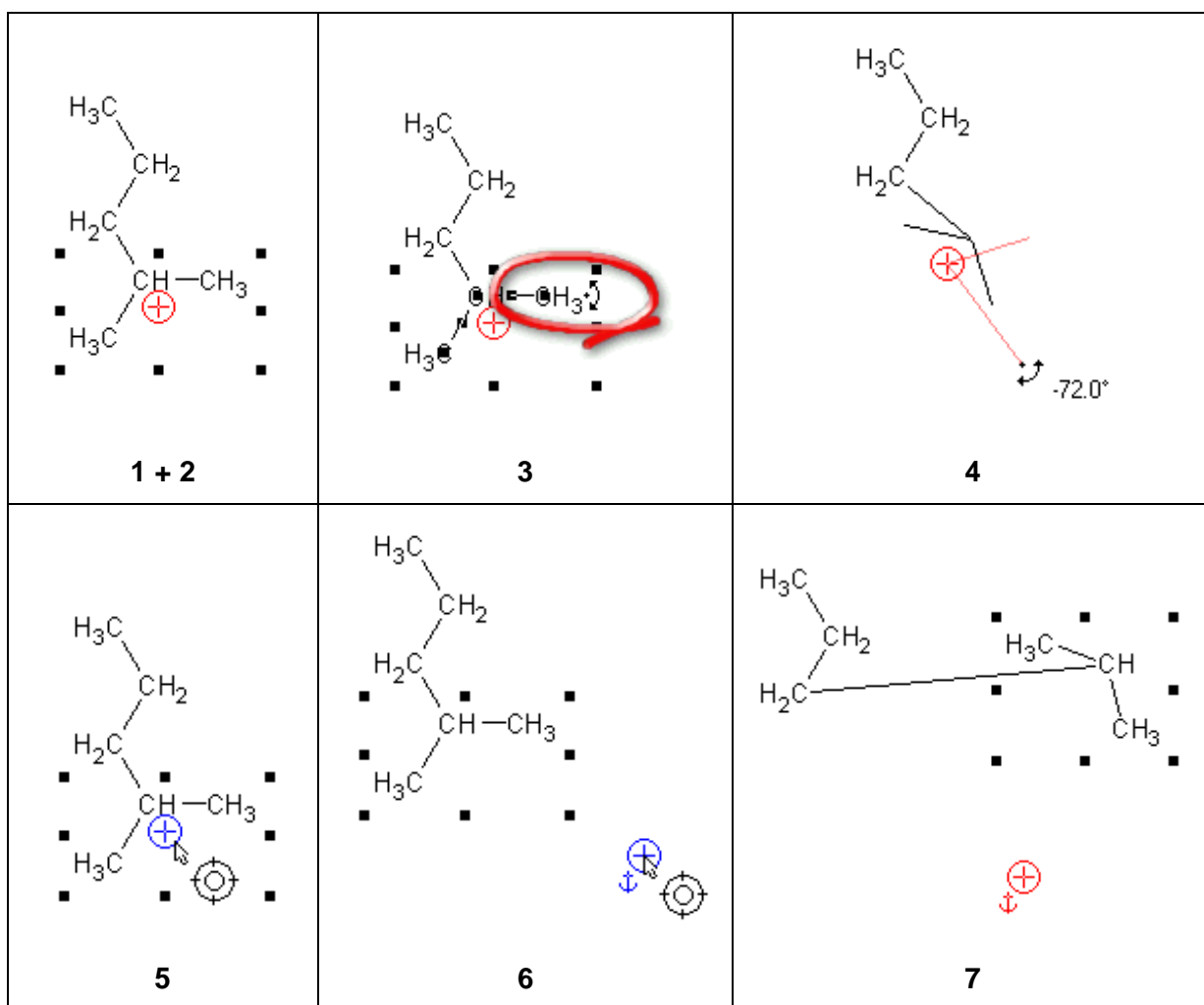
1. Vælg rotationsværktøjet og træk uden om en del af et tegnet molekyle.
2. Det markerede forsynes med sorte skaleringshåndtag, og der placeres en rød cirkel med et kryds i centrum af det markerede
3. Undersøg hvorledes markøren skifter form, når den placeres over de sorte håndtag
4. Træk i et af hjørnehåndtagene og observer, hvorledes størrelsesforholdet løbende angives
5. Slip musetasten og se den skalerede del
6. Klik uden for det markerede for at fjerne markeringer



Udvælgelse og rotation

1. Vælg rotationsværktøjet og træk uden om en del af et tegnet molekyle.
2. Det markerede forsynes med sorte skaleringshåndtag, og der placeres en rød cirkel med et kryds i centrum af det markerede
3. Undersøg hvorledes markøren skifter form til et rotationssymbol, når den placeres over et atom eller en binding (vist i det indrammede)

4. Træk med musen. Du kan løbende følge med i, hvor stor en vinkel du har drejet. Bemærk, at den valgte del af molekylmodellen drejer som en helhed omkring det viste omdrejningscentrum
5. Omdrejningscentret kan flyttes. Peg på det musen, og bemærk hvorledes centret skifter farve fra rød til blå, samtidig med at markøren skifter form.
6. Træk omdrejningscentret til ønsket position. Det forsynes med et lille anker
7. Peg på molekylet og træk i et af rotationshåndtagene (over et atom eller en binding). Du får igen den løbende visning af drejningsvinklen. Denne gang blot om det nye rotationscentrum.



Udvælgelse og kopiering

Du kan hurtigt lave en kopi af hele din struktur eller en markeret del deraf. Med CTRL-tasten holdt nede trækker du blot med Select/Move-værktøjet. Du får en skygge af det valgte hæftet på markøren, og du kan slippe den nye struktur et passende sted på arbejdsområdet.

3D rotation

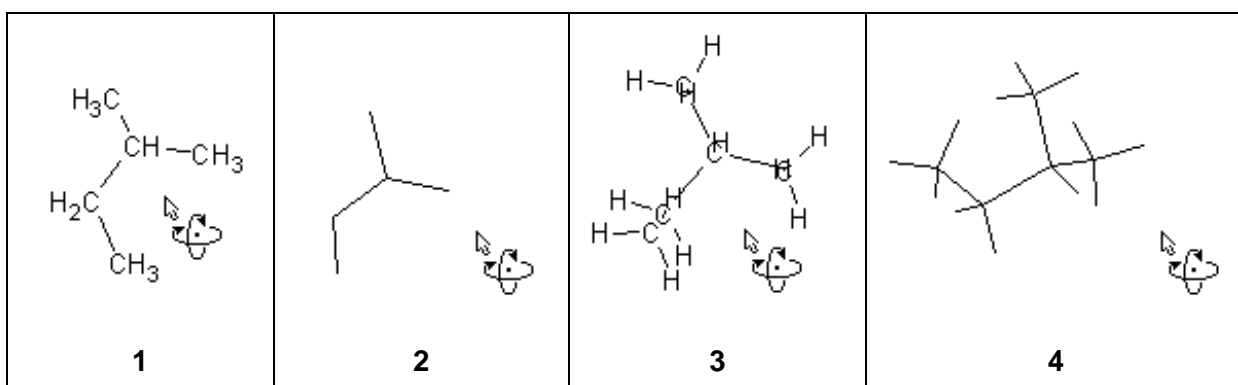
Den sidste knap i denne gruppe () giver mulighed for at rotere modellen i 3 dimensioner.

1. Der er tegnet en molekylmodel, og 3D-værktøjet er valgt. Markøren illustrerer rotation i 3 dimensioner
2. Der trækkes med musen i et af modellens atomer eller en af dens bindinger. Modellen skifter til en simpel visning, medens der roteres. Symboler for atomer i modellen skrives på, når musetasten slippes.
3. I forbindelse med 3D-rotation vil man ofte først foretage en *3D-optimering* af modellens struktur. Det gøres med den sidste knap til højre på værktøjslinien:



Resultatet af brug af denne knap er vist i 3. Modellen "ekspanderes" så alle atomer vises med binding. Det hele projiceres ned i planen uden sædvanlige 3D-effekter, så det stationære billede er måske ikke så oplysende.

4. Trækkes der nu i et af modellens atomer eller i en af dens bindinger, så skifter visningen igen til en simpel form, hvor kun bindinger vises. Den indbyrdes rumlige orientering bliver tydelig, når modellen roteres med musen. Når musetasten slippes, forsynes alle atomer igen med symboler

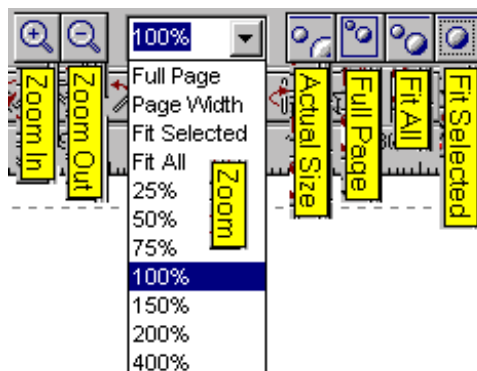


Note: ChemSketch kan samarbejde med det tilhørende program *3D viewer* (filnavn: Show3d.exe). Her får man en lang række muligheder for at vise modellen i "rigtig" 3D i flere forskellige visningsformater. Mere om det senere.

Funktioner til ændring af sidevisning

I den sidste del af den øverste række funktionsknapper findes værktøjer til at ændre sidevisning (zoom og udsnitstørrelse). Knappeerne er her vist med deres Tool Tips (roteret), og med drop down boksen foldet ud.

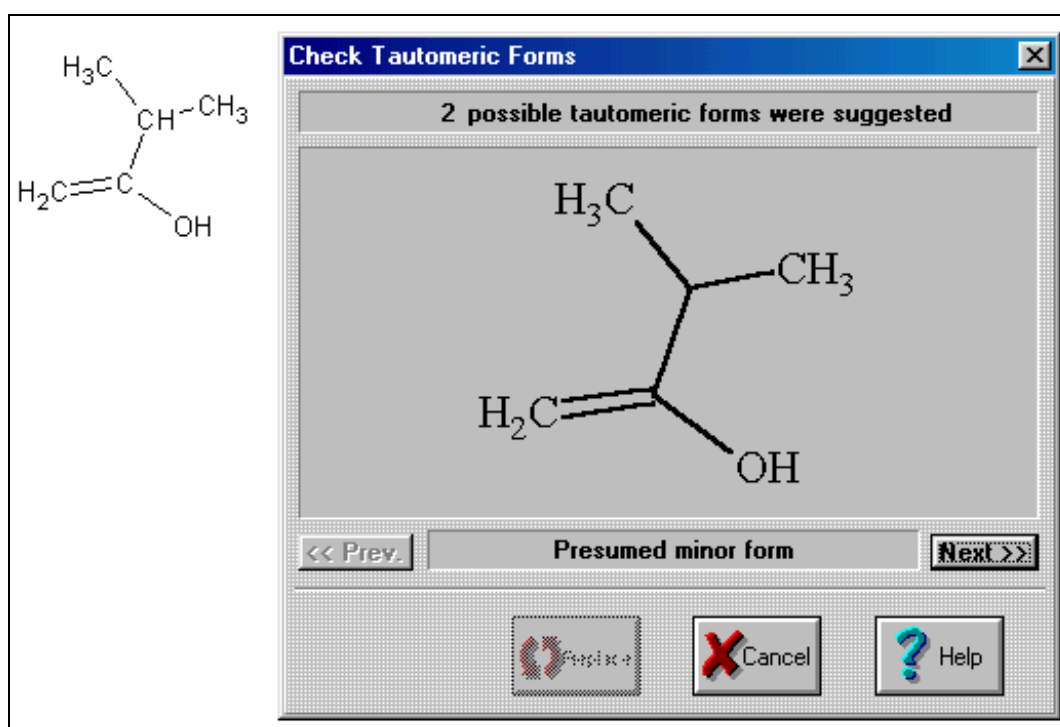
Det fremgår, at knapperne stort set er hurtige genveje til muligheder i drop down listen.

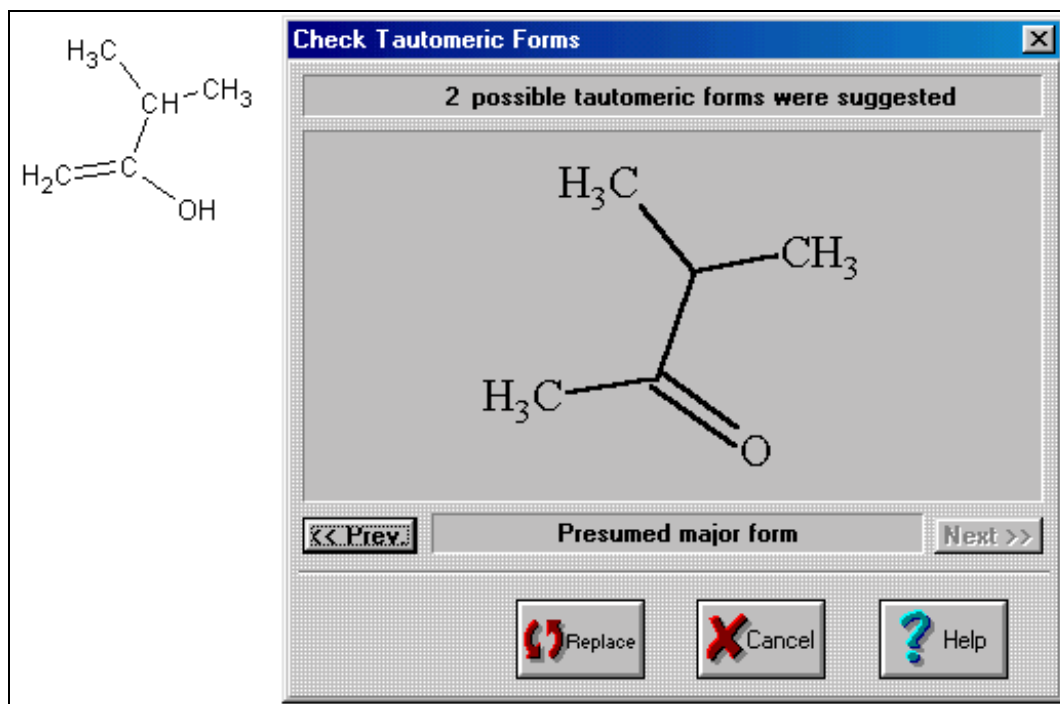



Kemiske værktøjer

Check for tautomeri

Som det næstsidste værktøj i Structure-værktøjslinien (2. række) finder du en knap til undersøgelse af mulige tautomere former. Hvis du fx har tegnet 3-methylbut-1-en-2-ol, og du så klikker på Check for Tautomeric Forms, så vil programmet opdage, at der er mulighed for keto – enol tautomeri. Det giver følgende dialogboks





Hvis du i den sidste boks klikker på knappen Replace (), så erstattes molekylmodellen i arbejdsområdet med den viste form.

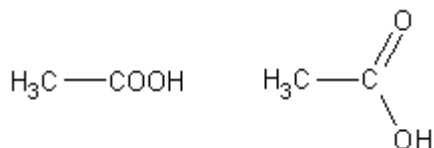
1 Vis eller skjul symbol for aromatiske ringe

Har du molekylmodeller med aromatiske ringe, kan du vælge, om ChemSketch skal forsyne de aromatiske ringe med den sædvanlige cirkel, eller om du vil have ringene vist med alternerende dobbeltbindinger. Valget styres fra menuen Tools – Show Aromaticity eller Tools - Hide Aromaticity. Som med andre værktøjer virker de på hele arbejdsområdet, hvis der ikke er markeret dele, ellers virker de på det markerede. Fra menuen kan du samtidig se genvejstasterne for disse funktioner.

2 Skriv korte formler på udvidet form

Hvis du har indsat en standard gruppebenævnelse i en strukturformel (fx –COOH), så kan du med dette værktøj få tegnet de enkelte atomer i den sammenskrevne gruppe. Eksemplet med en carboxylsyregruppe bliver

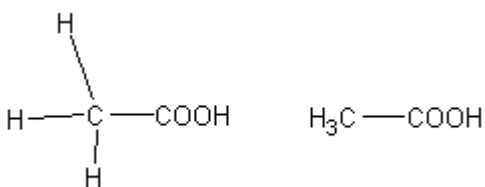
| Tools | Templates | Options | Documents | ACD/ |
|------------------------------------|-----------|---------|-----------|--------------|
| Structure Properties | | | | Ctrl+Shift+S |
| Clean Structure | | | | F9 |
| Check Tautomeric Forms | | | | Ctrl+Shift+T |
| 3D Structure Optimization | | | | Ctrl+Shift+3 |
| 1 Show Aromaticity | | | | Ctrl+Shift+A |
| Hide Aromaticity | | | | Ctrl+Shift+H |
| 2 Expand Shorthand Formulae | | | | Ctrl+Shift+F |
| 3 Remove Explicit Hydrogens | | | | Ctrl+Shift+R |
| Bring Bond(s) to Front | | | | Ctrl+F |
| Send Bond(s) to Back | | | | Ctrl+K |
| 4 Auto re-Numbering | | | | Ctrl+Shift+N |
| Clear Numbering | | | | Ctrl+Shift+L |
| 5 Calculate | | | | |



Værktøjet virker på det markerede eller på hele arbejdsområdet, hvis intet er markeret.

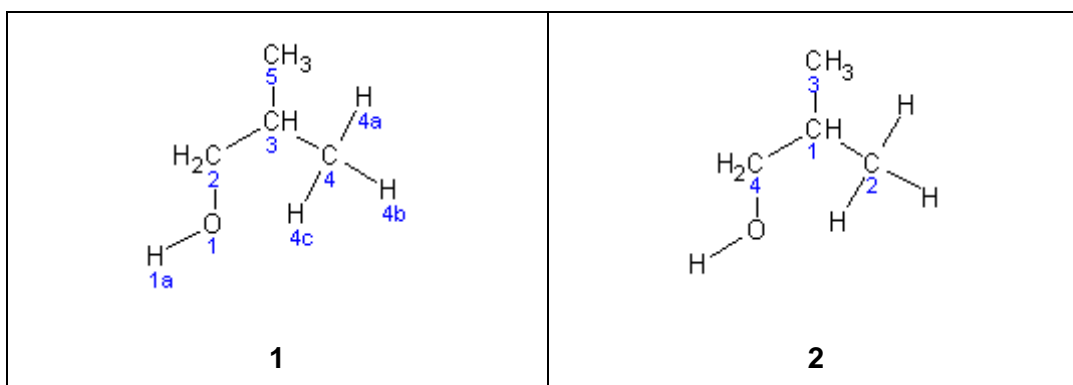
3 Fjern eksplicit angivne H-atomer

Har du tegnet eksplicitte H-atomer (valgt H-atomet som aktivt atom fra paletten til venstre), så kan du med dette værktøj lave alle eksplicit angivne H-atomer i det markerede eller i hele arbejdsområdet, hvis intet er markeret, til kondenserede angivelser, fx CH_3 eller CH_2



4 Lav eller fjern nummerering af atomer

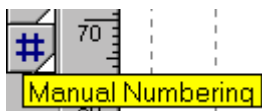
Dette sæt værktøjer giver mulighed for automatisk at lave eller fjerne en nummerering af atomer i det markerede eller for alle atomer i arbejdsområdet. Den automatiske funktionsmåde gør funktionens anvendelighed tvivlsom, idet der ikke nummereres efter kemiske principper



I ramme 1 er anvendt "Auto re-numbering" på en model med eksplicitte H-atomer på C-atomet med nr. 4 og på O-atomet med nr. 1. ChemSketch forsyner alle eksplicit angivne atomer med et nummer, idet H-atomer dog nummereres efter hvilket atom, de er bundet til.

I ramme 2 er anvendt samme værktøj, men denne gang med C-atomerne markerede. Nummereringen svarer til den rækkefølge, som ChemSketch har tegnet atomerne i.

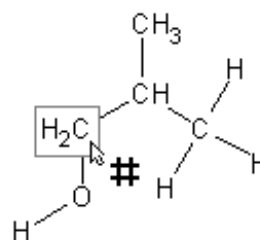
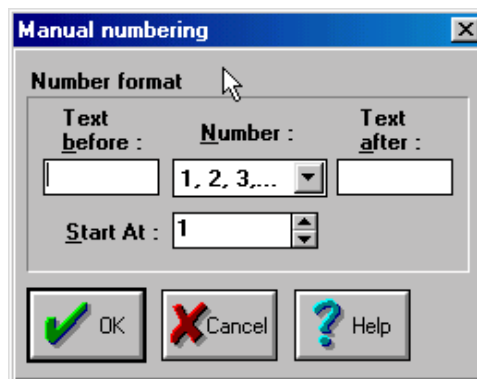
Manuel nummerering



Fra værktøjspaletten til venstre på skærmen, nederste punkt, kan vælges et værktøj til manuel nummerering af atomerne i en molekylmodel.

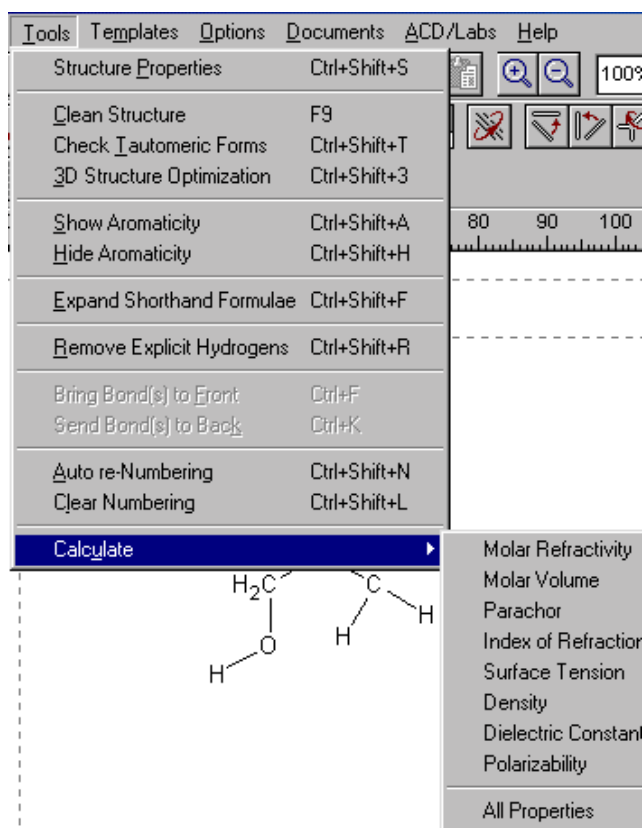
Klik på nummertegnet. Der kommer en dialogboks, hvor du kan definere formatet på den nummerering, du ønsker. Almindeligvis klikker du blot på OK.

Markøren skifter til et nummertegn med en pil, og du tilføjer et nummer i den definerede rækkefølge efterhånden som du klikker på modellens enkelte atomer.



5 Beregn molekulære egenskaber

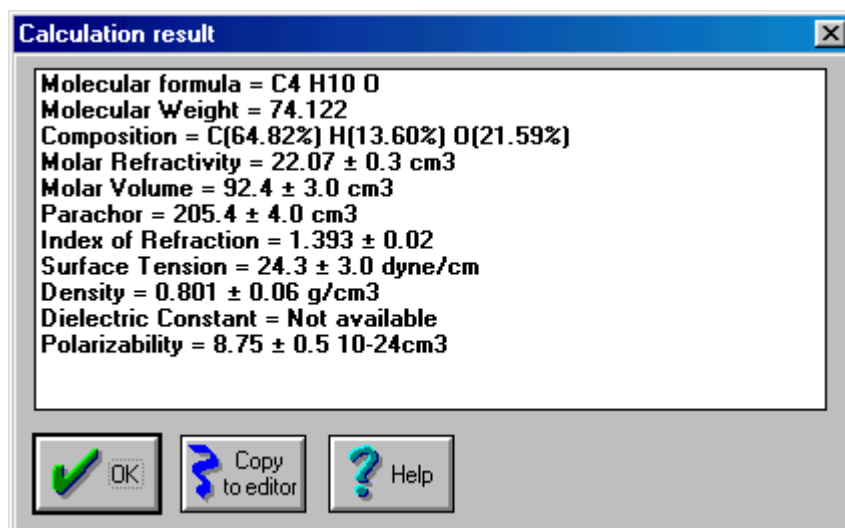
Denne funktion er tæt i familie med knappen nederst til højre på statuslinien. Fra knappen på statuslinien kan du vælge, hvilken af en række molekulære størrelser, du vil have vist løbende i statuslinien. (Som standard vises den molare masse). Værktøjet fra Tools-menuen giver mulighed for at foretage en anden beregning end den løbende viste, og ikke mindst for at kopiere beregningsresultatet til den pågældende ChemSketch side som et objekt i Draw tilstand.



Alle beregningsresultater fra menu-punktet vises i et særligt resultatvindue. Vinduet lukkes ved klik på OK.

Vær opmærksom på, at de angivne størrelser er *beregnete*. Der er altså ikke tale om opslag i et tabelværk. Derfor angives de beregnede værdier også med et usikkerhedsinterval.

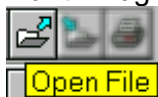
En særlig mulighed er det nederste valg: All Properties. Vælges dette punkt får du de viste resultater plus molekylformel, molar masse og grundstofsammensætningen i masseprocent.



Hent og gem tegninger og molekylmodeller

Tegninger og molekylmodeller lavet i ChemSketch gemmes som standard i programmets eget format, hvor filerne har filtype sk2. Til arbejde inden for ChemSketch er det godt.

Hent: Brug enten File | Open fra menulinien eller knappen fra knap-panelet:



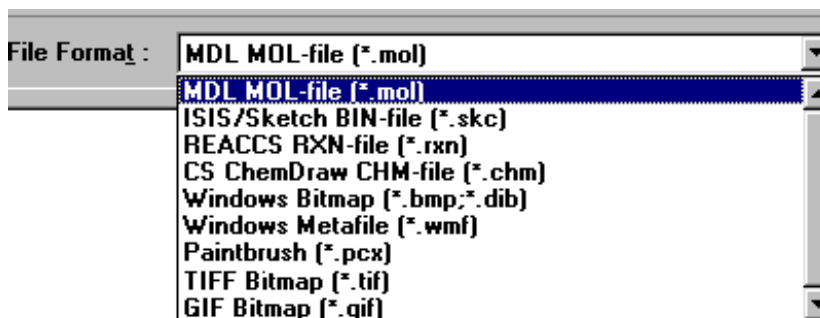
Gem: Brug enten File | Save eller File | Save as fra menulinien eller knappen fra funktionslinien:



Andre filformater

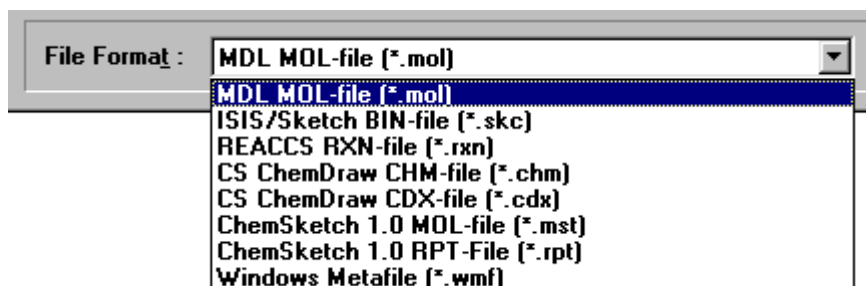
Du kan gemme tegninger og molekylmodeller i en række andre filformater, der bruges af andre programmer, og som er en mere almen standard en ChemSketch's eget filformat.

Gem i et andet filformat: Fra menulinien vælges File | Export. Fra drop-down listen i Export-dialogen vælges den ønskede fil-type.



De fire øverste muligheder (.mol, .skc, .rxn og .chm) er formater fra andre programmer til behandling af molekylmodeller. Af disse møder man nok oftest mol-typen. De fem nederste er forskellige grafikformater, der bruges, hvis modellen skal eksporteres som et stationært billede til brug i dokumenter.

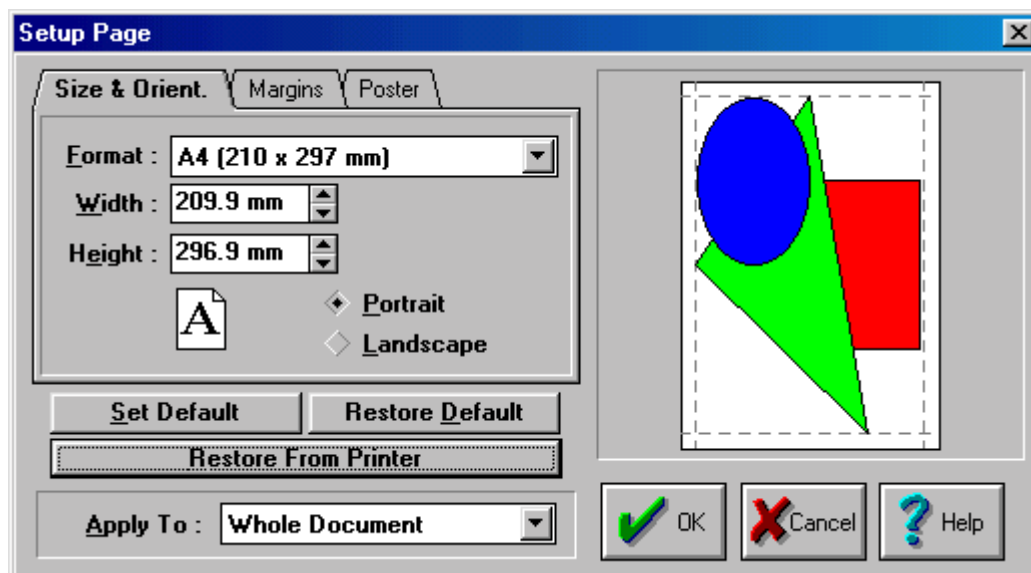
Indlæs fra et andet filformat: Fra menulinien vælges File | Import. Fra drop-down listen i Import-dialogen vælges den ønskede filtype.



Fra Import dialogen kan man selvfølgelig kun vælge filtyper, der indeholder oplysninger om molekylmodellens strukturelle egenskaber. Der kan ikke importeres fra rent grafiske filformater. ISIS-formatet (filtype: *.skc) hører til et andet gratis program til tegning af molekylmodeller. Programmet kan downloades fra MDL Information Systems (<http://www.mdli.com>). Interessant er også formatet CS ChemDraw (filtype: *.cdx). Filer i dette format kan hentes fra den gratis database ChemFinder (<http://www.chemfinder.com>), og kan efterfølgende læses ind i ChemSketch.

Udskrift

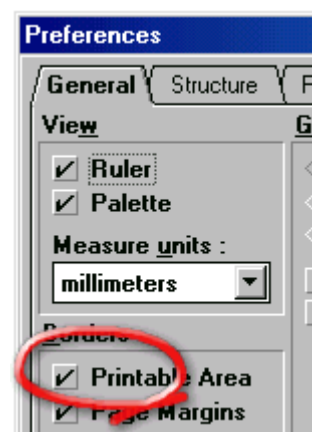
Inden udskrift på en tilsluttet printer kan det være nyttigt at undersøge sideopsætning og printeropsætning. Det sker fra menuen med hhv. File | Page Setup og File | Printer Setup. I sideopsætningsdialogen kan papirstørrelse, liggende eller stående udskrift, samt margener defineres.



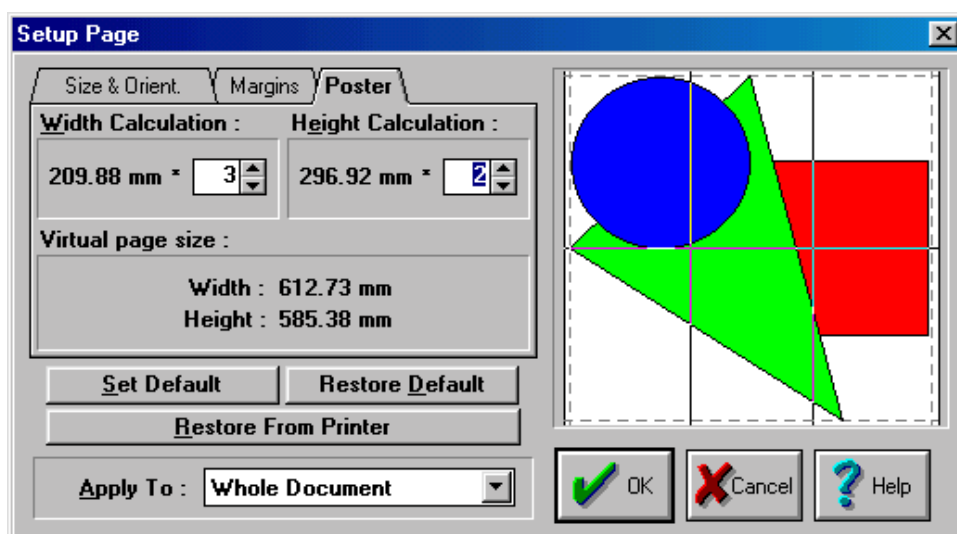
Udskriv plakat

Fanebladet Poster i Page Setup giver mulighed for at sprede en udskrift over et antal standardsider i højde og/eller bredde, så der kan laves en større plakat ved at sammenlime siderne efter udskrift. For at dette skal virke, skal du:

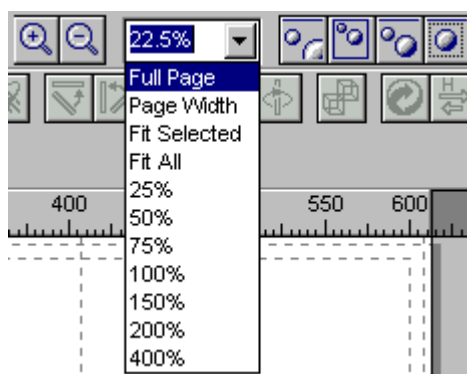
I menuen Options | Preferences sætte flueben ved View Printable Area



I Page Setup menuen vælges fx et layout som vist nedenfor med 3 sider i bredden og 2 sider i højden



For at se hele plakaten vælges Full Page fra Zoom-menuen som vist her. (Du kan ane, at den virtuelle side i arbejdsområdet er opdelt i flere standardsider)




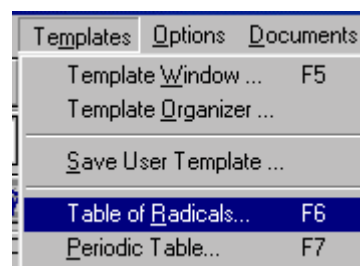
Tegning af mere komplicerede strukturer (Hæm)

Som et eksempel gennemgås en mulig metode til tegning af hæm-strukturen fra hæmoglobin. Undervejs benyttes de indbyggede skabeloner i ChemSketch, samt andre af de tidligere omtalte funktioner. Hæm-strukturen kan tegnes på mange andre måder. Den her gennemgæede skal bl.a. illustrere brugen af færdige skabeloner og anvendelsen af egen tegning som skabelon.

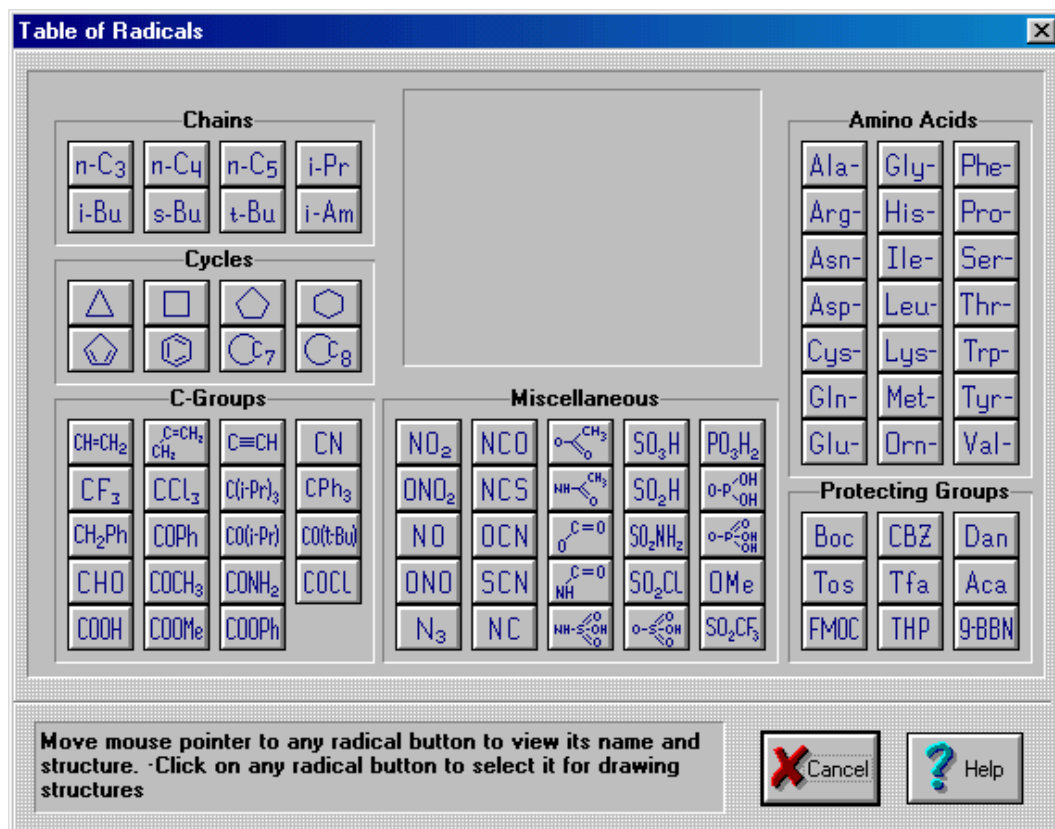
Start med et blankt arbejdsområde

Fra menulinien (Templates | Table of Radicals...) med genvejstast F6 åbnes for en samling prædefinerede radikaler.

Du kan også klikke på knappen  øverst til højre for arbejdsområdet.



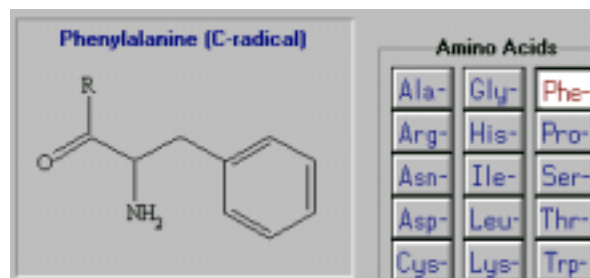
Samlingen af radikaler (og ringstrukturer) vises i et vindue:



Bemærk teksten nederst i vinduet. Flyttes musen hen på radikalet Phe- (øverst til højre), så ser det således ud.

R i radikalets formel angiver det sted, hvor binding til eksisterende molekyle sker.

Radikalet kan også anbringes isoleret på arbejdsområdet, så erstattes R med et H.



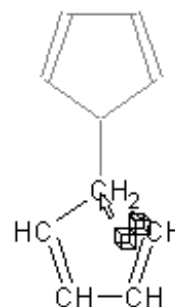
Fra tabellen over radikaler vælges cyclopentadien-ringen (Bemærk, at ringene ikke har noget R til markering af bindingspunktet)

I arbejdsområdet skifter markøren udseende, og den fører en skyggeudgave af ringen med sig. Klik, der hvor du vil have ringen placeret.

Bemærk at du får tilføjet den valgte struktur under knappen til radikalmenuen til højre for arbejdsområdet. Det gør det let at vælge det samme radikal igen senere.

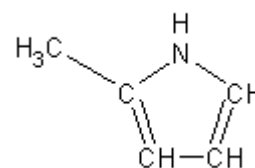



Der kan stadig tegnes videre med den valgte ring, men et *højreklik* fjerner ringen, og returnerer til almindelig tegnemåde.

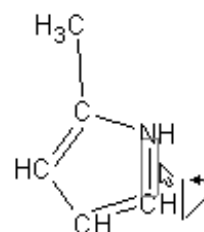


Brug atom-paletten til venstre for arbejdsområdet til at lave denne struktur.


- Træk en methylgruppe ud (C-atom)
- Skift atomtype øverst i ringen (N-atom)

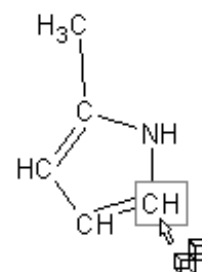


Brug Set Bond Vertically () fra værktøjslinien til at vippe modellen. Sådan ser det ud lige efter, at du har klikket på den viste binding.

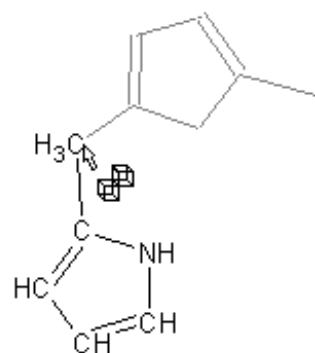


Nu bruger du funktionen Instant Template fra

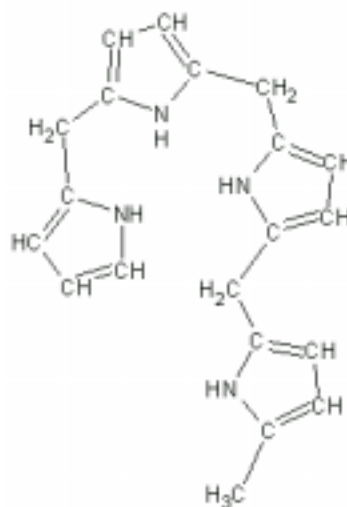
værktøjslinien () . Du peger på det viste C-atom med den "nye" markør. Bemærk, at den har samme udseende, som fra Radikal-menuen. Klik, og modellen i arbejdsområdet bruges nu som skabelon




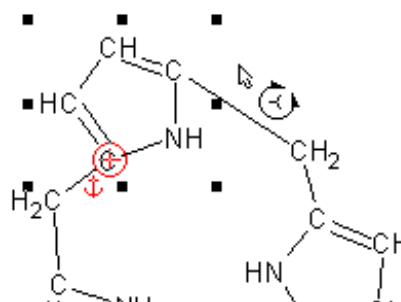
Flyt markøren op til C-atomet i sidekæden, og klik for at afsætte en kopi af din skabelon




Gentag dette to gange til, så du får noget, der ligner dette.
Det ligner ikke helt den normale pæne og symmetriske struktur – endnu

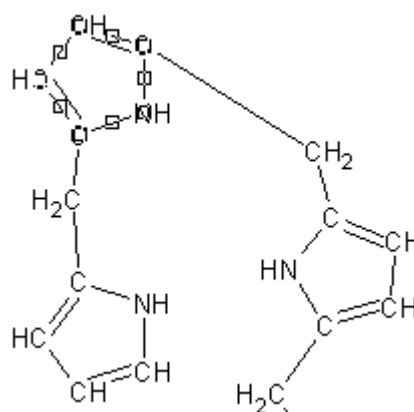


- Markér den øverste ring (træk en kasse eller en lasso rundt om)
- Vælg Rotations-værktøjet fra værktøjslinien (Select/Rotate/Resize )
- Flyt omdrejningspunktet (se figur)
- Drej så C-N-bindingen bliver lodret

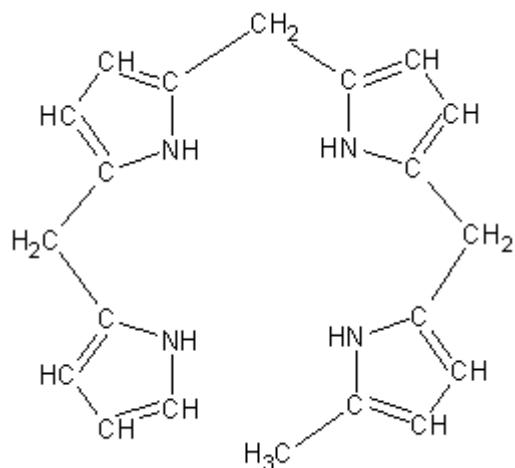




Vælg flytte-værktøjet fra værktøjslinien

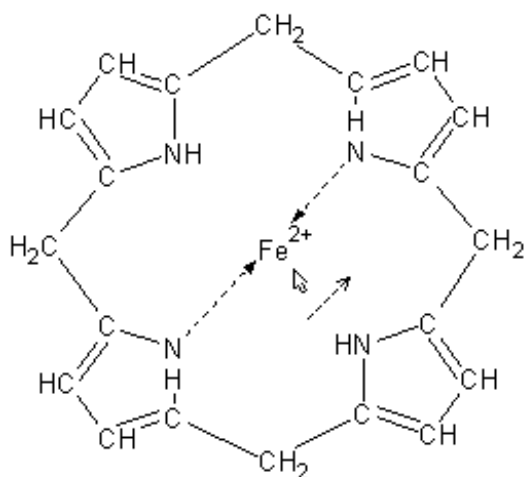
(Select/Move ) , og flyt det valgte, så de to nu lodrette C-N-bindinger i modellens venstre del ligger over hinanden



Gentag dreje- og flytte-operationer på de resterende to ringe og i fornødent omfang på de sammenbindende CH₂-grupper, til du får noget, der ligner dette

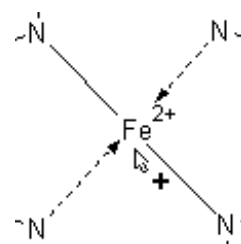




- Den sidste binding sættes på med bindingsværktøjet ()
- Fra "Periodisk System" øverst til venstre for arbejdsområdet vælges Fe-atomet, der placeres midt i strukturen.
- Vælg Coordinating Bonds fra værktøjslinien () og tegn to bindinger fra de viste N-atomer til Fe-atomet (ionen)



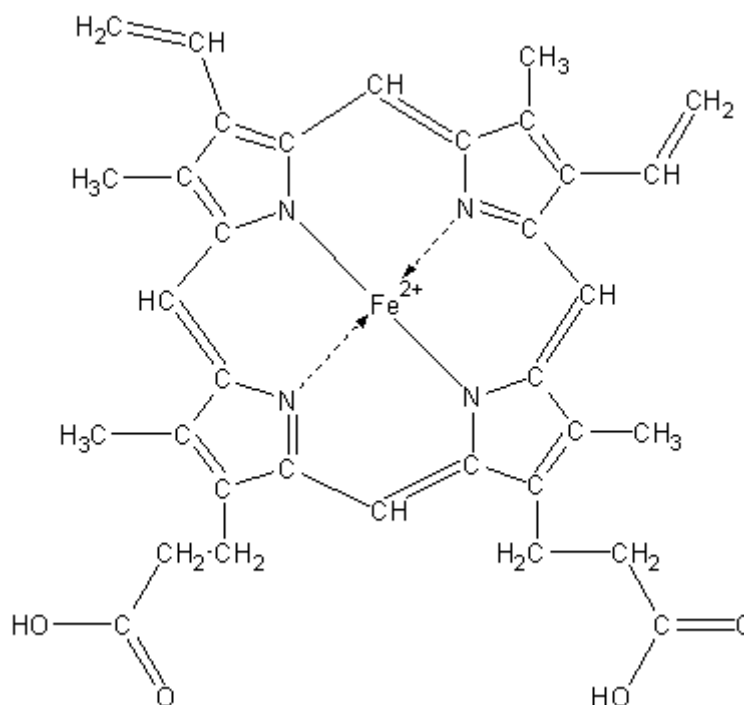
Brug det normale bindingsværktøj til at tegne de to manglende N-Fe-bindinger



Fra paletten i venstre side vælges +-værktøjet (Increment (+) Charge). Klik to gange på Fe, så der igen står ladning 2+



- Med det normale bindingsværktøj justeres bindingstyperne i modellen
- Dernæst tilføjes de nødvendige sidekæder
 - $-\text{CH}_3$ her trækkes med et C-atom
 - $-\text{CH}=\text{CH}_2$ her bruges vinylradikalet fra radikalvinduet ()
 - $-\text{CH}_2\text{CH}_2\text{COOH}$ her bruges først to gange C-atomet og dernæst carboxylradikalet fra radikalvinduet ()

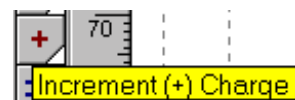
Sådan skulle den færdige model gerne se ud



NB! Det kan være fristende at bruge Clean () undervejs eller ved afslutning af sådan et større tegnearbejde. Det går som regel helt galt! Skulle det gå galt, så kan du altid komme tilbage med fortryd-knappen ()

Arbejde med ladninger

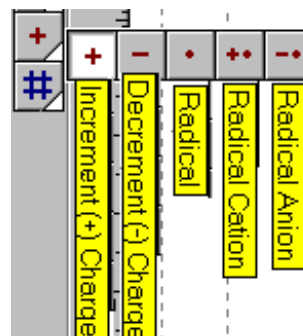
Under tegningen af Hæm-strukturen ændrede du på ladningen af det centrale Fe-atom. Værktøjet hertil findes til venstre for arbejdsområdet. I standardtilstanden ser det således ud (med Tool Tip)



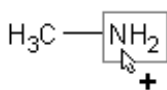
Denne knap og de to naboknapper har en lille hvid trekant i nederste højre hjørne. Ved klik på denne trekant folder værktøjet sig ud, så du kan vælge blandt et antal beslægtede funktioner.



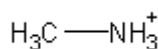
Her ses knappen udfoldet med (roterede) Tool Tips



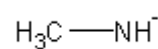
Amino-gruppe



methanamin



Methylammonium



Methylradikal

Tegn et methanmolekyle i arbejdsområdet. Vælg Radikal-værktøjet og klik en enkelt gang på methanmolekylet. Det ændres til et methylradikal:



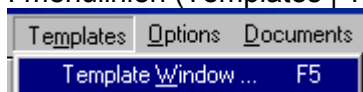
Tip: Når du arbejder med ladningsværktøjet kan du

- Skifte mellem + og – ved højreklik et tomt sted i arbejdsområdet
- Skifte cyklisk mellem de tre radikal-typer ved højreklik et tomt sted i arbejdsområdet

Mere om skabeloner

ChemSketch har en anden og mere specialiseret samling af skabeloner. Du finder den

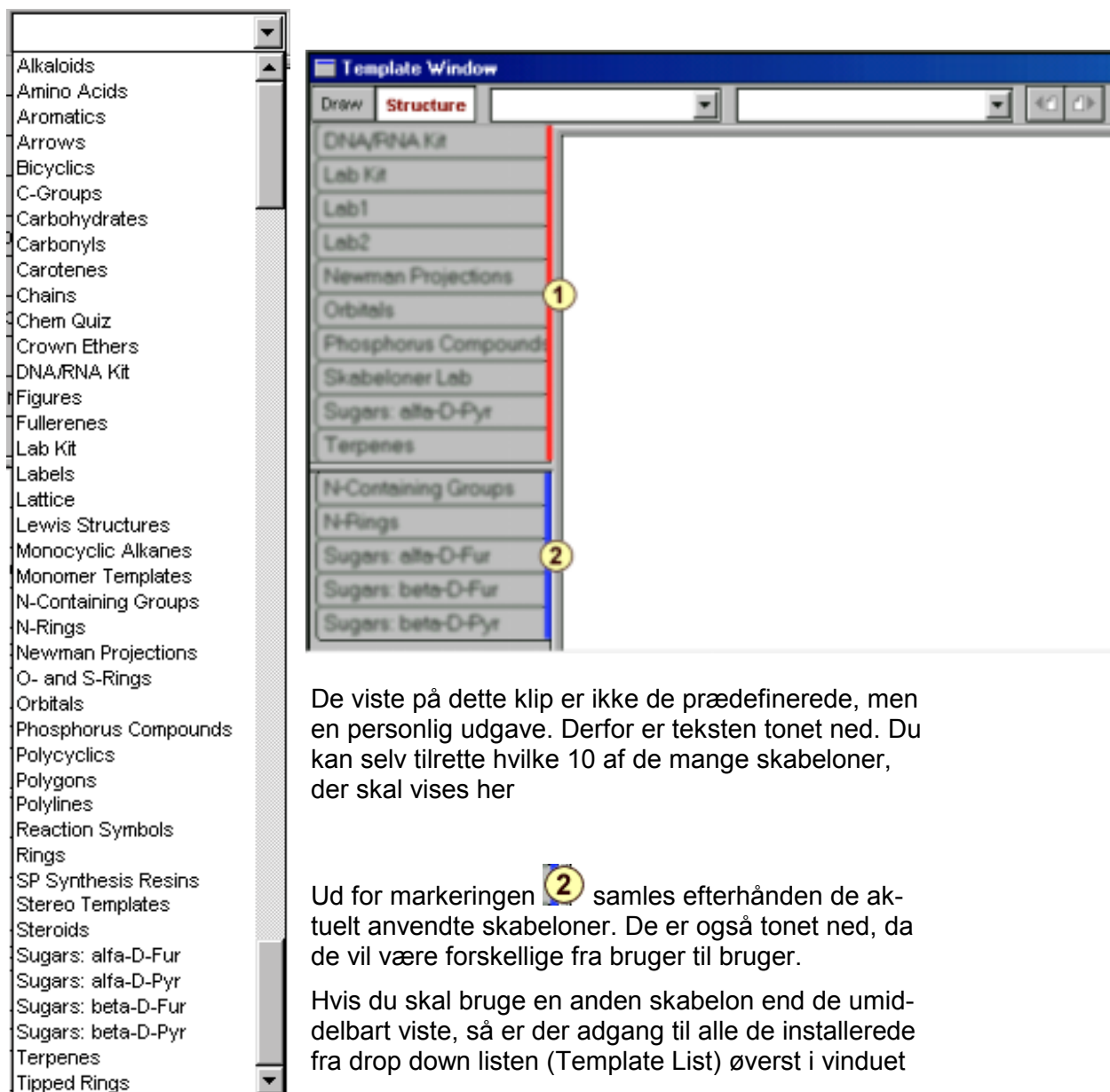
- I menuen (Templates | Template Window...)



- Med genvejstasten F5

- Fra den øverste værktøjslinje. Knappen: 

ChemSketch installeres med 10 prædefinerede skabelonfiler umiddelbart tilgængelige fra skabelon-vinduet. Placeringen af de 10 er markeret med **1** på figuren ved siden af, der viser øverste venstre hjørne af skabelonvinduet.



De viste på dette klip er ikke de prædefinerede, men en personlig udgave. Derfor er teksten tonet ned. Du kan selv tilrette hvilke 10 af de mange skabeloner, der skal vises her

Ud for markeringen **2** samles efterhånden de aktuelt anvendte skabeloner. De er også tonet ned, da de vil være forskellige fra bruger til bruger.

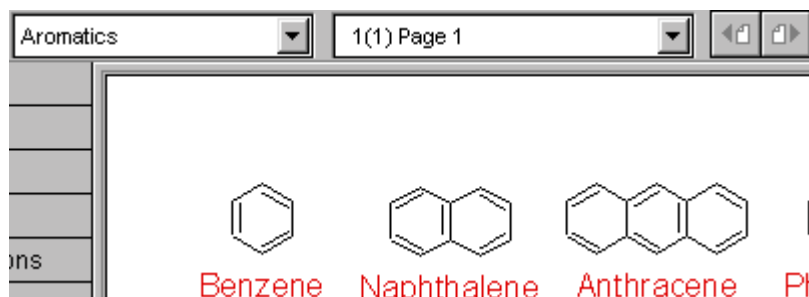
Hvis du skal bruge en anden skabelon end de umiddelbart viste, så er der adgang til alle de installerede fra drop down listen (Template List) øverst i vinduet



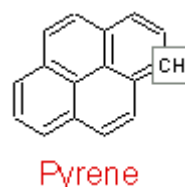
Klik på pilen og listen vist til venstre herfor folder sig ud (Den viste er stykket sammen af flere klip. Den rigtige liste er kortere og med scroll bar).

Benzpyren

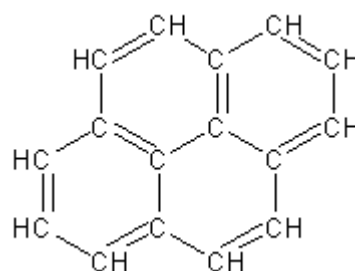
- Fold skabelonlisten ud og vælg Aromatics. Den valgte skabelonsamling har 1 side:



- Lokaliser Pyren (3. række, nr. 4), og placer markøren på et af C-atomerne. Læg mærke til, hvorledes atomer og bindinger markeres, når du peger på dem med musen. Det atom eller den binding, du klikker på, bliver det sted, hvor skabelonen kan hæftes på eksisterende molekylmodeller i arbejdsområdet. Når du som her starter tegning af et nyt molekyle, er det underordnet, hvor du klikker i skabelonen.



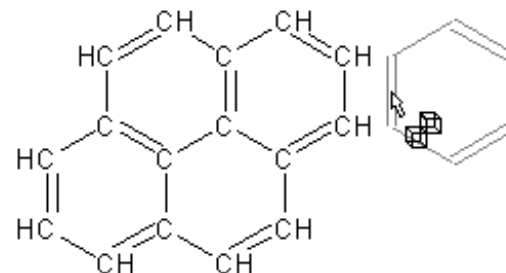
- Skabelonvinduet lukkes automatisk, når du klikker på en skabelon, og du får en skabelonmarkør, med en skygge af den valgte skabelon i arbejdsområdet. Klik én gang for at afsætte skabelonen, og højreklik derefter for at gøre dig fri af skabelonen. Pyrenmolekylet er nu tegnet i arbejdsområdet.



- Åbn skabelonvinduet igen, og vælg denne gang en benzen-skabelon. Benzenringen skal fusioneres med den lodrette binding øverst til højre i pyrenmolekylet. Derfor skal du vælge den venstre, lodrette binding i benzen-skabelonen. I arbejdsområdet har du en skabelonmarkør med en benzenring, der sidder med en binding på markørpilen og du kan sætte ringen på, så du får benzpyren. Hvis du har fået valgt et C-atom (et "hjørne"), så kan du ikke smelte de to ringe sammen. Højreklik, så du "slipper" skabelonen, og vælg igen fra skabelonvinduet.



Benzene



- Til sidst kan tegne markeringer for aromatiske ringe i din model. Fra menuen vælges Tools | Show Aromaticity. Hvis du har andre modeller i

arbejdsområdet, kan du evt. først markere benzpyrenmolekylet.

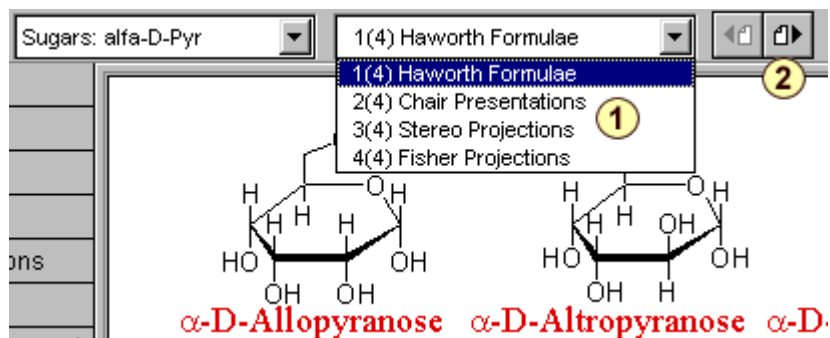
Maltose

Et eksempel på brug af skabelon med flere sider.

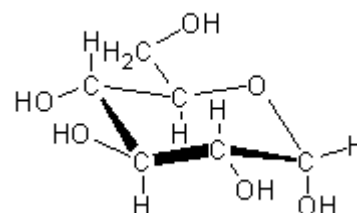
Åben Skabelonvinduets og vælg:
Sugars: alfa-D-Pyr fra drop down listen med skabeloner.

Denne samling indeholder 4 sider med forskellige repræsentationer af de samme skabeloner. Du kan vælge side fra drop down listen

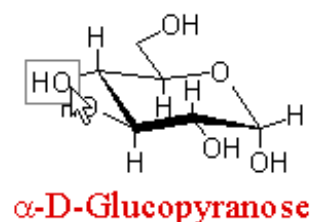
1 eller du kan blade gennem siderne med 2



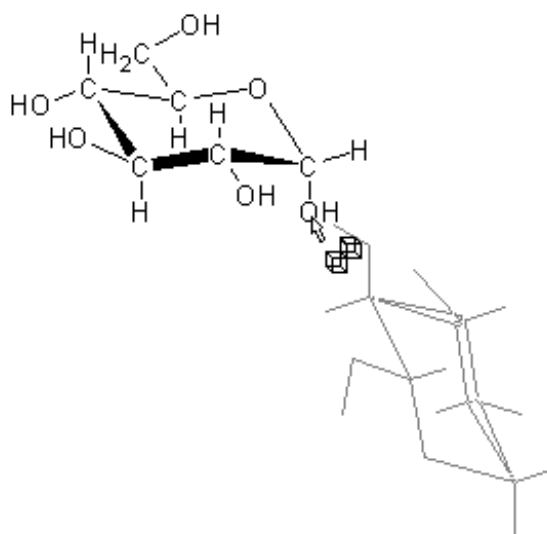
Vælg side 2, Chair Presentations. Vælg α -D-Glucopyranose (maltose består af to glucose-enheder bundet sammen med en α -1,4-glycosidbinding) og afsæt en kopi af skabelonen i arbejdsområdet. Højreklik for at slippe skabelonen.



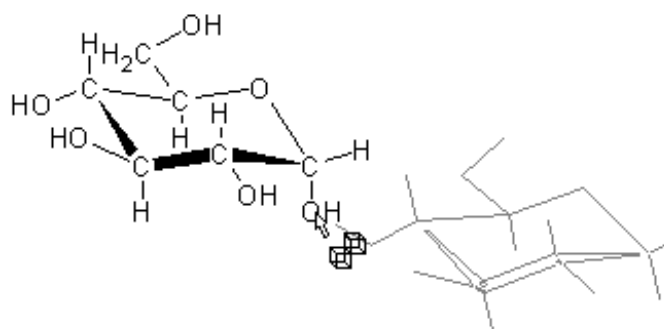
Åbn skabelonvinduet igen. Hvis den allerede tegnede glucose skal være tegnet til venstre i maltosemolekylet, så skal du have fat i den næste kopi af glucose-skabelonen ved OH-gruppen på C-atom nr. 4



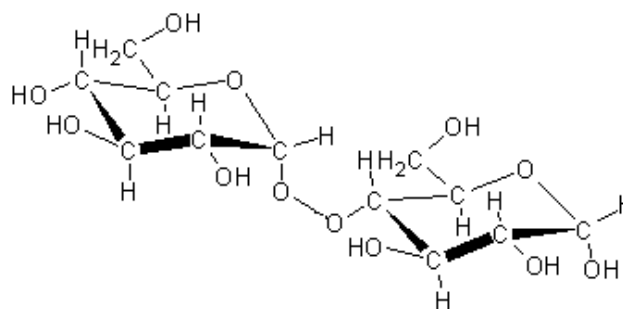
Før musen ind over OH-gruppen på C-atom nr. 1 på det første glucosemolekyle



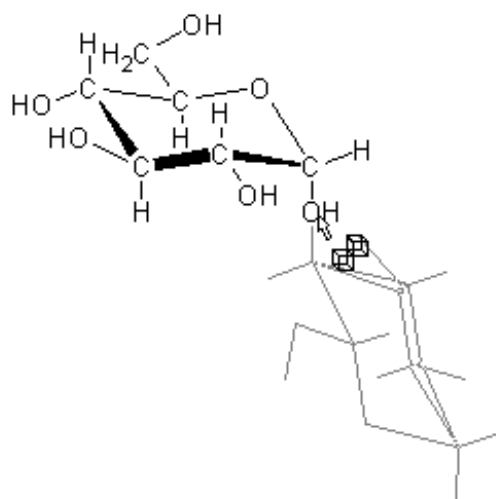
Du kan "flippe" skabelonen med TAB-tasten (en eller to gange for at få den viste orientering)



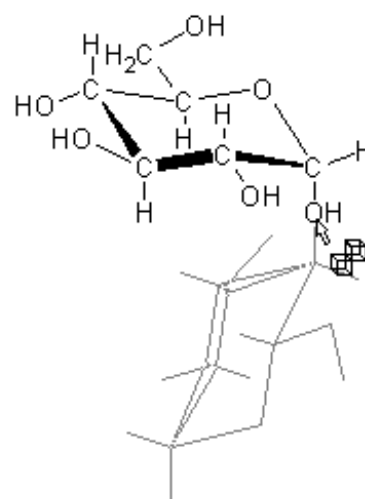
Klik med musen – det ser ikke godt ud! I stedet for en C-O-C-binding har du fået en C-O-O-C-binding. Hvis du blot klikker på et atom, bliver skabelonen forbundet til dette atom med en binding (antallet af H-atomer justeres automatisk). Brug fortryd-knappen til at fjerne den sidst tilføjede glucose-enhed.



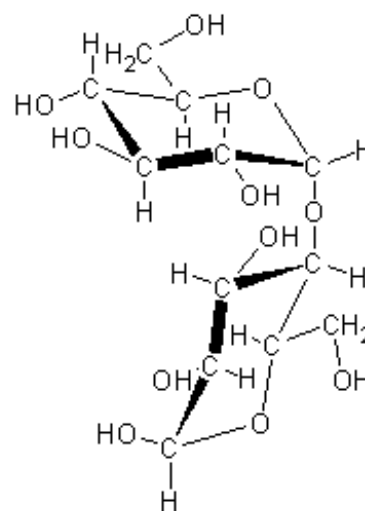
Hvis du har højreklikket, så vælg glucose på samme måde som før. Peg på det samme C-atom (nr. 1) igen, og hold SHIFT-tasten nede. Derved kobles skabelonen direkte på det eksisterende atom uden en ekstra binding. Bemærk at skabelonen ser spejlvendt ud.



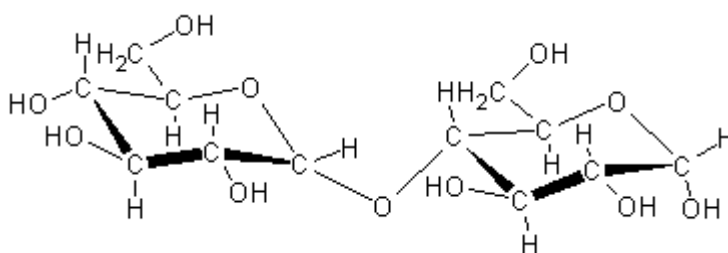
Hold SHIFT-tasten nede og tryk én gang på TAB-tasten for at flippe skabelonen.





Klik, og du får den rigtige α -1,4-glycosidbinding.
Højreklik for at slippe skabelonen



Brug de sædvanlige rotations- og flytteværktøjer for at pynte på modellen til noget, der ligner dette



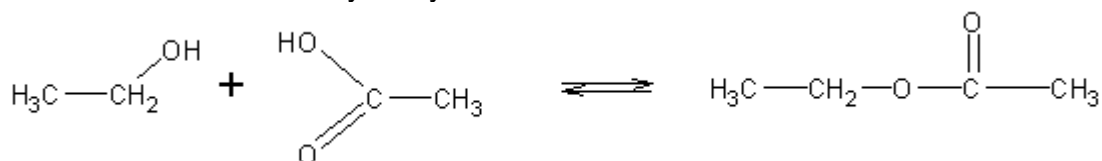
Reaktionsskemaer med molekylmodeller

Der er let tilgængelige værktøjer i værktøjslinealen for konstruktion af reaktionsskemaer: et plus-tegn, , og et udvalg af pile. Knappen til valg af pile har en lille hvid trekant i nederste højre hjørne, .

Ved klik på den åbnes paletten til valg af pil-type:



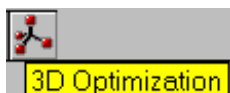
Med disse værktøjer bliver det let at lave et reaktionsskema, der fx viser ligevægten ved dannelse af ethansyreethylester:



Fra 2D til 3D (I)

Et tegnet molekyle (eller et markeret blandt flere) kan omdannes til en tredimensionel model, der stadig vises i det normale arbejdsområde (dvs. som en projektion ind på tegnefladen). Senere omtales programmet Show3d.exe, der samarbejder med ChemSketch, og som leverer en visuelt bedre version af en 3D model.

Værktøjet til dannelse af den simple 3D-model findes i værktøjslinien, hvor det er symboliseret med en lille tetraedrisk model:



NB! Du skal *ikke* bruge 3D-optimeringsværktøjet, hvis du skal bruge 3D-vieweren (Show3d.exe), der har sit eget 3D-optimeringsværktøj

Der er egentlig kun brug for File- og Edit-menupunkterne (og et par punkter fra Options). De øvrige menupunkter findes dupliserede som knapper i værktøjslinien. Værktøjslinien med udfoldede "Tool Tips" ses nedenfor og omtales nærmere i det følgende.

Menupunktet File kan bruges til import af strukturfiler til 3d-vieweren fra .mol filformatet, til at åbne tidligere gemte 3D-modeller (filtype *.3ds), til at gemme sådanne og til at udskrive vinduets indhold til printer.

Menupunktet Edit har kun et punkt: Copy. Det kopierer selvfølgelig vinduets indhold til udsklipsholderen, hvorfra det kan indsættes i andre programmer.


I menupunktet Options kan du vælge egne værdier for de radier, der anvendes til visning af atomerne. Du kan også definere, gemme eller hente en fil med værdier for de forskellige indstillinger til programmet.

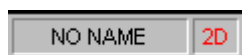
Funktionsbjælke til vinduesskift

Når både ChemSketch og ACD/3D er aktive, dukker der en ny bjælke op i skærbilledets nederste del:

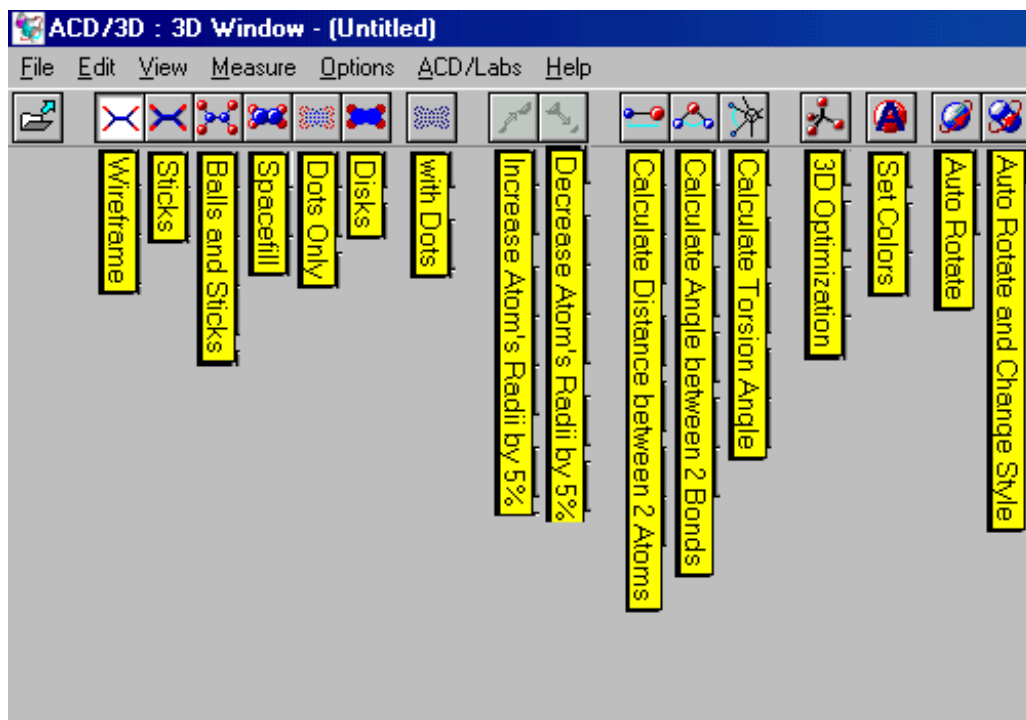


Det aktive program får vist sin knap med rød skrift, og der sker selvfølgelig ikke noget ved at klikke på den knap. Klik på knappen med det andet programs navn skifter selvfølgelig dette program frem som det aktive.

Knappen , ChemSketch-vinduet kopierer det markerede i arbejdsområdet (eller hele arbejdsområdet, hvis intet er markeret) til ACD/3D. Hvis den model, der kopieres til ACD/3D ikke har været gennem en 3D-optimering i ChemSketch, så vises dette i bunden af vinduet med et lille "2D" efter filnavnet (eller NO NAME, hvis arbejdsområdet i ACD/3D ikke er blevet gemt).



Værktøjslinien i ACD/3D



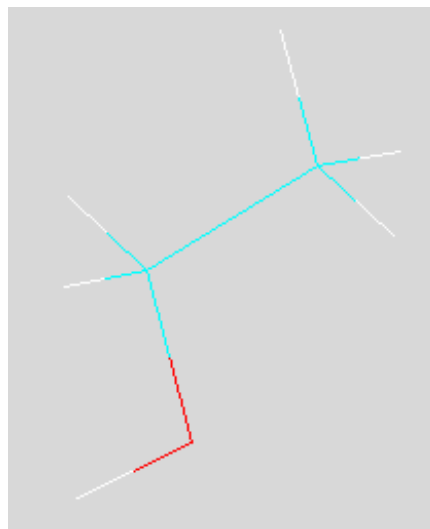
Indstillinger til ACD/3D

I alle de følgende skærmbilleder er der vist en grå baggrund i ACD/3Ds vindue. Det er ikke en af ACD/3Ds egne indstillinger i punktet Set Colors, men er lavet af hensyn tryk på papir.

De viste modeller er alle først blevet 3D-optimeret i ACD/3D (Knappen 3D Optimization – se nedenfor).

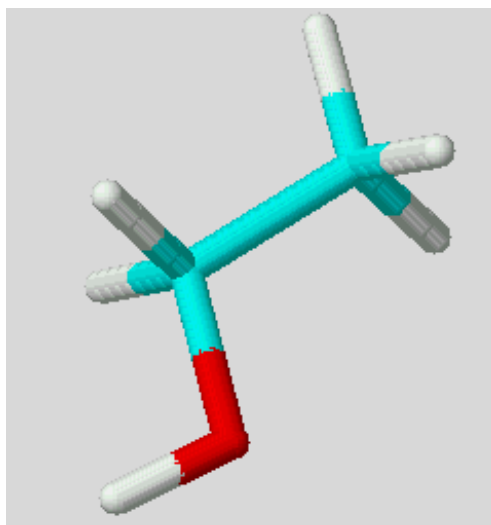
Wireframe

Fremstillingen er en ren stregformel, hvor atomerne sidder for enderne, eller i knæpunkter på stregerne. Stregerne er farvekodet efter atomtype.



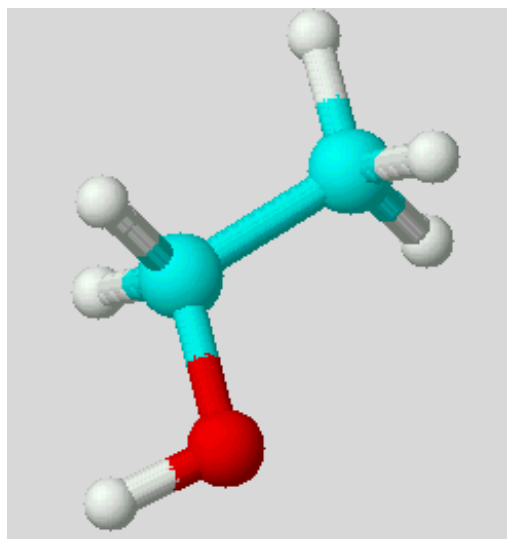
Sticks

Stregerne får tykkelse, og der antydes rumlig struktur på stængerne.



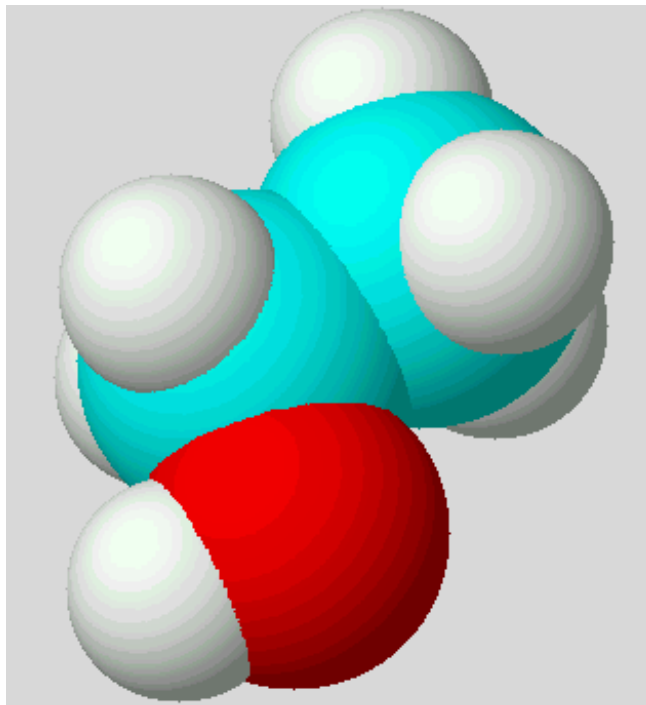
Balls and Sticks

Ingen overraskelser – pinde og kugler



Spacefill

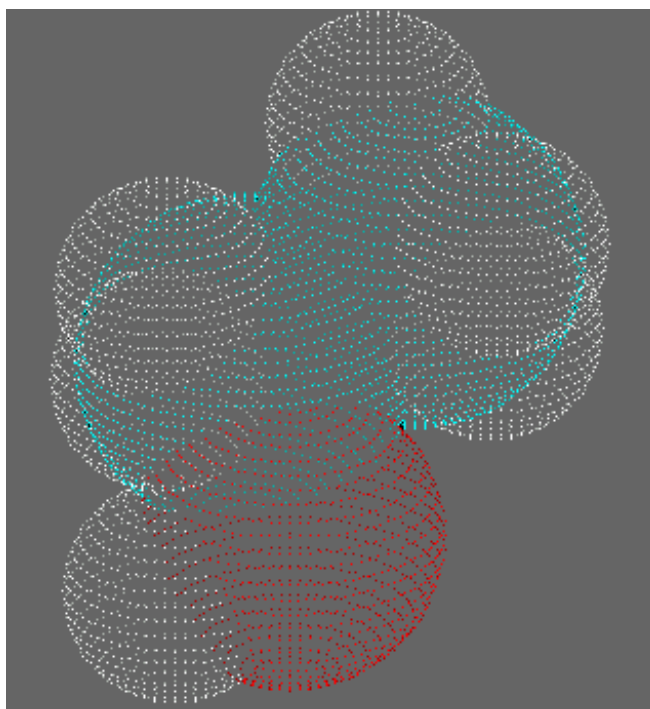
Spacefill giver et indtryk af de ydre grænser for molekylets elektronsky.



Dots only

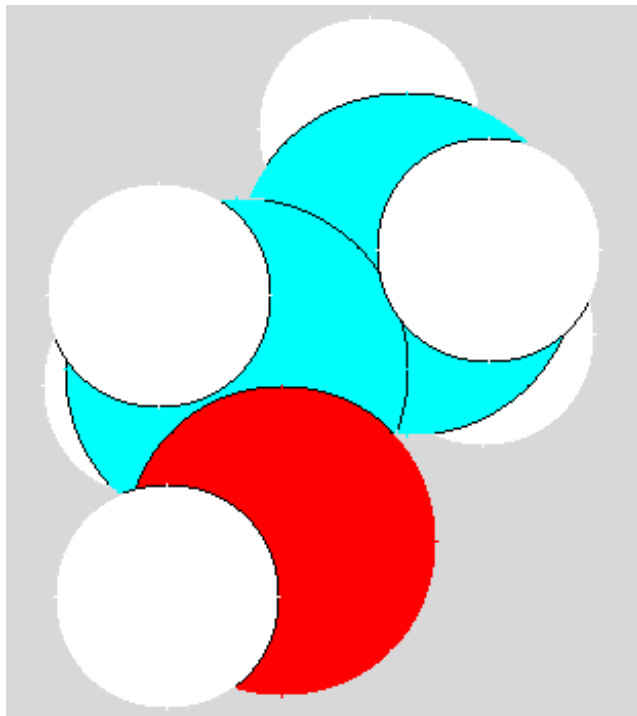
De ydre konturer fra Spacefill markeres med prikker (farvekodet).

(Baggrunden gjort lidt mørkere for at kunne se de hvide prikker fra H-atomerne)



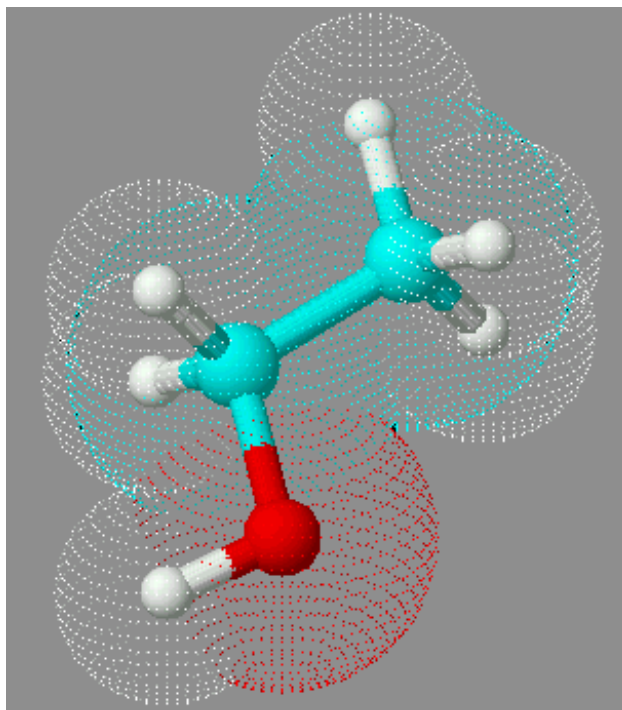
Disks

Atomerne repræsenteret ved ensfarvede skiver uden skyg-
gelægning. Skivernes over-
lapning giver 3D-
fornemmelse.



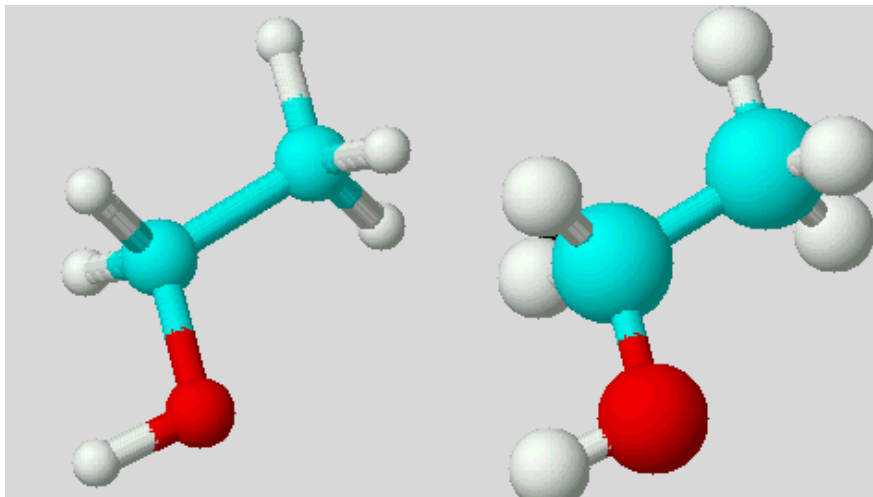
With Dots

Bruges til at lægge elek-
tronskyens ydre begrænsninger
ind på en model. Her vist på
Pind og Kugle



Increase Atom's Radii by 5%

Tre tryk på Increase Atom's Radii by 5% ændrer det venstre billede til det højre.



Decrease Atom's Radii by 5%

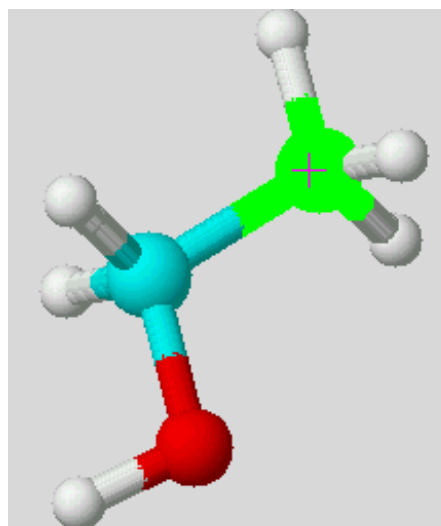
Tre tryk på Decrease Atom's Radii by 5% bringer billedet tilbage igen.

Calculate Distance between 2 Atoms

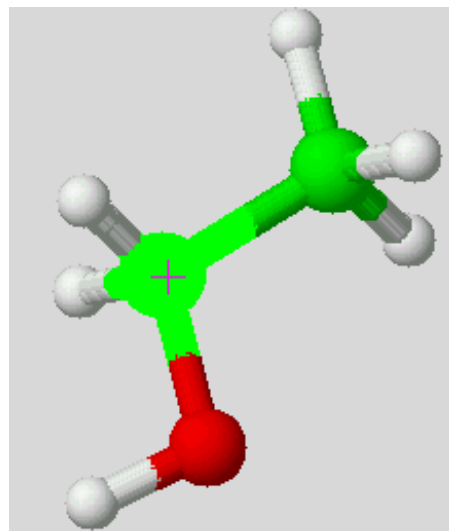
Når dette værktøj vælges, vises følgende hjælp i vinduets bund.

Distance(*, *): Select 2 atoms

Klik på det første atom. Dets interne nummer sættes ind på den ene stjernes plads. Her er vist atom C1.



Klik på det næste atom. Dets interne nummer sættes ligeledes ind, og afstanden vises.



Afstanden mellem C1 og C2 er 1,5257 Å

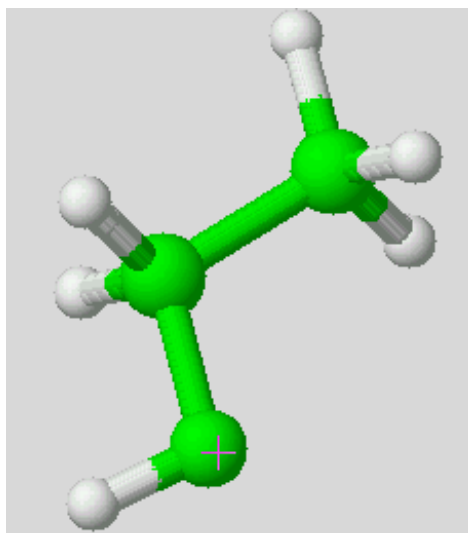
Distance(C 1, C 2) = 1.5257 Å

Calculate Angle between 2 Bonds

Når værktøjet vælges, vises den lille hjælpetekst (Select 3 atoms) nederst i vinduet.

BondAngle(*, *, *) : Select 3 atoms

De tre ønskede atomer vælges, og de markeres med den valgte markeringsfarve (se Set Colors)

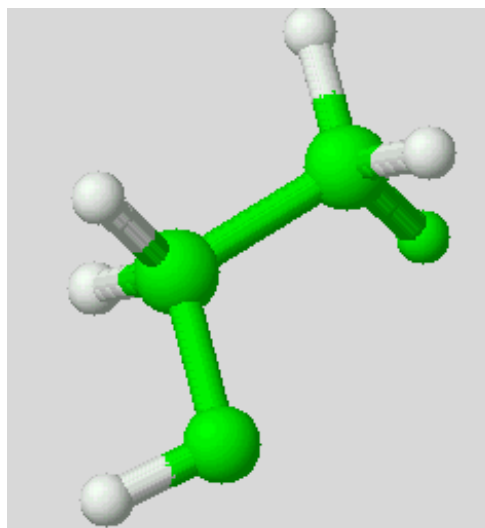


Bindingsvinklen vises

BondAngle(C 1, C 2, O 3) = 110.811 Deg

Calculate Torsion Angle

Denne gang skal der vælges 4 atomer. Vinklen mellem de to yderste bindinger vises.



TorsionAngle(H 4, C 1, C 2, O 3) = 61.191 Deg

3D Optimization

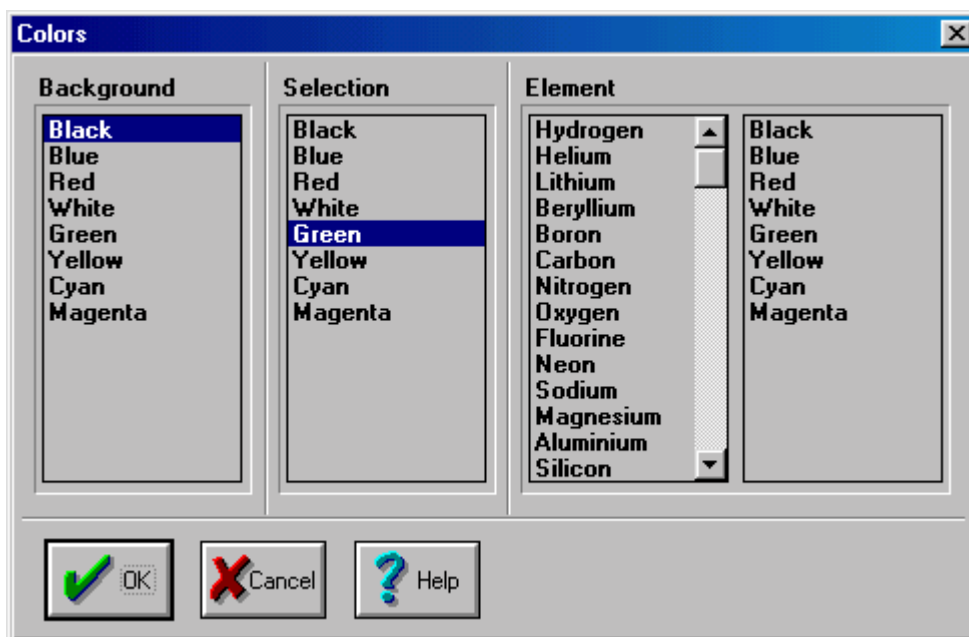
Programmet gennemløber sin 3D-optimeringsalgoritme. Modellen skifter form, og du kan se beregningens fremadskriden i vinduets bund (for små molekyler går det hurtigt!).

Konvergenen mod et minimum vises i form af en gradient, der forhåbentlig aftager pænt.

Grad: 2.22855975

Samtidig vises en CANCEL-knap, til brug hvis processen ser ud til at være for langvarig, eller hvis der ikke findes konvergens. Skulle dette ske, så kan man prøve at ændre lidt på strukturen i ChemSketch, eksportere til ACD/3D, og så lave en ny 3D-optimering

Set Colors



Som det ses er der en række muligheder for baggrunden, for farve til visning af markeret atom, samt en mulighed for at definere egne farver for de forskellige atomer.

Auto Rotate

Knappen starter en automatisk rotation af modellen i vinduet. Rotationsaksen ændres på tilfældig måde, så der gives en god fornemmelse af molekylmodellens (molekylets) rumlige struktur.

Auto Rotate and Change Style

Virker som den foregående, men nu skiftes der også på tilfældig måde mellem de forskellige visningsformer.