

ACD/ChemSketch

Verze 5.0 pro Microsoft Windows

Uživatelská příručka

Kreslení chemických struktur a grafiky

český překlad Pavel Drašar



Vyhraj!!!
viz detaily o
soutěži uvnitř

Advanced Chemistry Development Inc.

Copyright © 1994-2001 Advanced Chemistry Development Inc. All rights reserved.

ACD/Labs is a trademark of Advanced Chemistry Development Inc.

Microsoft is a registered trademark and Windows is a trademark of Microsoft Corporation.

PDF, Acrobat and Portable Document Formats and associated data structures and operators are copyright © Adobe Corporation.

IBM is a registered trademark of International Business Machines Corporation.

All the other trademarks mentioned within this Manual are the property of their respective owners. All trademarks are acknowledged.

Information in this document is subject to change without notice and is provided "as is" with no warranty. Advanced Chemistry Development Inc. makes no warranty of any kind with regard to this material, including, but not limited to, the implied warranties of merchantability and fitness for a particular purpose. Advanced Chemistry Development Inc. shall not be liable for errors contained herein or for any direct, indirect, special, incidental or consequential damages in connection with the use of this material. Totéž platí o českém překladu.

Česká verze SciTech® Praha, Nad Šárkou 75, 160 00 Praha 6, www.scitech.cz. Verze využívá často „nečeské“ anglizmy, které jsou však v počítačové a internetové odborné mluvě běžné. Překlad také někdy sleduje opis anglického termínu s tím, že předpokládá užitečnost záměn anglického a českého termínu. Nevýhodu to má v tom, že bychom to česky řekli někdy jinak.

Připomínky k českému překladu pište na scitech@scitech.cz.

Part number: G10_0308CZ

Obsah

1. Úvod	1
1.1 Co vlastně je ACD/ChemSketch	1
1.2 Další moduly	1
1.3 Co je nového ve verzi 5.0	2
1.3.1 Obecné funkce programů ACD/Labs	2
1.3.2 Funkce specifické pro ChemSketch	3
1.4 Co bylo nového ve verzi 4.5	3
1.5 Tento průvodce	4
1.6 Užitečné definice	4
1.7 Demo verze	5
1.8 Freeware verze	5
1.9 Pro další informace	6
1.9.1 Web Site – webová adresa	6
1.9.2 Jak kontaktovat ACD	6
1.9.3 Online Updates—Novinka verze 5.0!	6
2. Základy ACD/ChemSketch	7
2.1 V kapitole probereme	7
2.2 Startujeme s ACD/ChemSketch	7
2.3 Nastavení přidružených souborů—Novinka ve verzi 5.0!	8
2.3.1 Změna přidružení souborů	8
2.4 Změna předvoleného podadresáře	8
2.5 Módy structure a draw	9
2.5.1 Okno módu Structure	10
2.5.2 Okno módu Draw	11
2.6 Ukončení práce s ChemSketch	12
3. Kreslení jednoduchých struktur	13
3.1 V kapitole probereme	13
3.2 Kreslení atomů, vazeb a substituentů	13
3.2.1 Použití nástroje běžného kreslení (Draw Normal)	13
3.2.2 Dvojně a trojně vazby	14
3.2.3 Odstranění jednotlivých atomů	14
3.2.4 Povel k návratu do předchozího stavu (Undo)	14
3.2.5 Měnění atomů	15
3.2.6 Nástroj souvislého kreslení (Draw Continuous)	15
3.2.7 Kreslení tažením myši	16
3.2.8 Vyčištění (Cleaning) struktury	16
3.2.9 Použití prostorových koordinačních a nedefinovaných vazeb	16
3.2.10 Složitější substituenty	17
3.2.11 Kreslení řetězců	18
3.3 Převrácení struktur	19
3.4 Volba, otáčení a prostorové(3D) otáčení	21
3.5 Výstup	21
3.5.1 Uchování souboru ChemSketch (SK2)	21
3.5.2 Uchování struktur jako soubor MDL Mol (MDL Molfile)	21
3.5.3 Tisk	22
3.5.4 Zakomponování struktur do dokumentu	23
3.6 Vyčištění pracovní plochy	23

4.	Začínáme s ACD/I-Lab.....	24
4.1	V kapitole probereme	24
4.2	Obecné body.....	24
4.3	Možnosti připojení	25
4.4	Přístup jako host	26
4.5	Provedení výpočtu	26
4.6	Uživatel na zkušenou	28
4.6.1	<i>Jak obdržíme Demo Key.....</i>	<i>29</i>
4.7	Registrace.....	29
4.8	Aktivace vašeho účtu I-Lab.....	31
4.9	Logging In	31
5.	Kreslení složitějších struktur.....	32
5.1	V kapitole probereme	32
5.2	Použití tabulky substituentů	32
5.3	Kreslení cyklických struktur.....	33
5.4	Odstraňování atomů a fragmentů	34
5.4.1	<i>Odstraňování několika atomů najednou</i>	<i>34</i>
5.5	Záměna atomů	34
5.6	Kreslení dvojných a trojných vazeb.....	35
5.7	Kreslení nabitých atomů, aniontů a kationtů	35
5.8	Změna vlastností atomů.....	37
6.	Složitě struktury, řetězce SMILES, a reakční schémata.....	38
6.1	V kapitole probereme	38
6.2	2D optimalizace.....	38
6.2.1	<i>Nakreslení struktury cyklických alkanů</i>	<i>38</i>
6.2.2	<i>Tvorba struktury cyklického peptidu.....</i>	<i>39</i>
6.3	Řetězce SMILES - Novinka verze 5.0!.....	40
6.3.1	<i>Generování řetězců SMILES</i>	<i>41</i>
6.3.2	<i>Generování struktur z řetězců SMILES</i>	<i>42</i>
6.4	3D optimalizace.....	43
6.4.1	<i>Kreslení bicyklo[2.2]oktanu</i>	<i>44</i>
6.4.2	<i>Kreslení struktury triptycenu.....</i>	<i>45</i>
6.4.3	<i>Creating the Structure of Cubane</i>	<i>46</i>
6.4.4	<i>Kreslíme strukturu dodekahedranu ([5]fullerenu-C₂₀)</i>	<i>47</i>
6.5	Kreslení reakčního schématu.....	49
7.	Pokročilé kreslení, použití šablon.....	51
7.1	V kapitole probereme	51
7.2	Přehled.....	51
7.3	Tabulka substituentů	52
7.3.1	<i>Kreslíme strukturu fluoreskaminu.....</i>	<i>52</i>
7.4	Nástroj okamžité šablony	53
7.4.1	<i>Tvorba struktury cyklického oligomeru.....</i>	<i>54</i>
7.5	Okno šablon	55
7.5.1	<i>Nakreslení fragmentu molekuly DNA.....</i>	<i>55</i>
7.5.1.1	<i>Kreslení řetězce deoxyribose-5-fosfátových fragmentů</i>	<i>57</i>
7.5.1.2	<i>Přidání bazí</i>	<i>57</i>
7.6	Kreslení komplexních biomolekul.....	58
7.6.1	<i>Kreslení strukturního vzorce β-maltosy.....</i>	<i>58</i>
7.7	Definování uživatelských šablon.....	60

7.7.1	<i>Pomůcka úpravy okna šablon</i>	61
7.7.2	<i>Soubor Template.cfg</i>	61
7.7.3	<i>Hotové šablony</i>	62
8.	Tvorba grafických objektů	67
8.1	V kapitole probereme	67
8.2	Kresba energetického reakčního diagramu	67
8.2.1	<i>Kreslení křivek</i>	67
8.2.2	<i>Úprava křivky</i>	68
8.2.3	<i>Kreslení os X a Y</i>	69
8.3	Kreslení různých orbitalů.....	70
8.3.1	<i>Nakreslíme p-orbital</i>	70
8.3.2	<i>Kreslíme d-orbital</i>	71
8.3.3	<i>Kreslíme π-orbital</i>	72
8.4	Kreslíme vakuovou destilační aparaturu	73
8.4.1	<i>Opatření kresby popisky</i>	74
8.4.1.1	Přidání textových popisků	75
8.4.1.2	Popisky v bublinách	76
8.4.1.3	Úprava tvaru bublin	76
8.4.1.4	Seskupování prvků a rušení skupin	77
8.5	Kreslení dvoušroubovice DNA	77
8.6	Kreslení lipidů a micel	81
8.6.1	<i>Kreslení schématu lipidu</i>	81
8.7	Kreslíme plakát (poster).....	83
8.8	Převedení do formátu Adobe PDF – Novinka verze 5.0!	84
9.	Pracujeme se styly v módu struktur	85
9.1	V kapitole probereme	85
9.2	Změna stylu strukturních vzorců	85
9.2.1	<i>Použití stylu definovaného časopisem</i>	86
9.2.2	<i>Příprava obrázků pro publikaci</i>	87
9.3	Tvorba vlastního stylu	87
9.3.1	<i>Uživatelský styl: Sugar</i>	88
9.3.2	<i>Uživatelský styl: Phosphate</i>	89
9.3.3	<i>Uživatelský styl: Base</i>	89
9.3.4	<i>Uživatelský styl: Highlight</i>	90
9.4	Použití existujících stylů	91
9.5	Zvolení předvoleného stylu	92
10.	Práce se styly v kreslicím módu	93
10.1	V této části se naučíme	93
10.2	Změna stylu platného pro objekt.....	93
10.3	Zaznamenání stylu.....	94
10.4	Použití existujícího stylu	94
10.5	Volba předvoleného stylu.....	94
10.6	Práce se styly.....	95
11.	Výpočet makroskopických vlastností	96
11.1	V lekci probereme	96
11.2	Výpočet makroskopických vlastností	96
11.2.1	<i>Nabídka</i>	96
11.2.2	<i>Automatické zobrazení na stavové liště</i>	97
11.3	Algoritmus výpočtu vlastností	98

11.3.1	Molární objem, MV	98
11.3.2	Molární refraktivita, MR	99
11.3.3	Parachor, P_r	99
11.3.4	Hustota, d	99
11.3.5	Index lomu, n	99
11.3.6	Povrchové napětí, γ	99
11.3.7	Dielektrická konstanta, ε (permitivita)	100
11.3.8	Polarizabilita	100
11.3.9	Monoisotopická, nominální a průměrná hmota	100
11.4	Korelace (statistická) experimentálních dat	101
11.4.1	Distribuce predikční chyby molární refraktivity	101
11.4.2	Distribuce chyb predikce molárního objemu	101
11.4.3	Distribuce chyby predikce parachoru	102
11.4.4	Distribuce predikční chyby indexu lomu	102
11.4.5	Distribuce predikční chyby pro hustotu	103
11.4.6	Distribuce predikční chyby pro povrchové napětí	103
11.4.7	Distribuce chyby predikce dielektrické konstanty (permitivity)	104
12.	Klávesy speciálních funkcí	105
12.1	V lekci se naučíme	105
12.2	Tautomery	105
12.2.1	Příklady	106
12.2.2	Chyby v chemické literatuře	107
12.3	Encyklopedie	109
12.4	ACD/Name Freeware Add-on—Novinka verze 5.0!	110
12.4.1	Omezení volné verze (freeware) ACD/Name	111
13.	Dobřůtky - Goodies	112
13.1	Co jsou to „Goodies“?	112
13.2	Kde se získají?	112
13.3	Goodies	112
14.	Závěr	116

1. Úvod

1.1 Co vlastně je ACD/ChemSketch

ACD/ChemSketch je balík programů, jehož jádro tvoří editor chemických struktur firmy Advanced Chemistry Development, Inc. vytvořený tak, aby byl použitelný samostatně anebo integrován do jiných aplikací. ChemSketch se používá ke grafickému znázorňování chemických struktur, reakcí a schemat. Také může být využit k tvorbě chemicky orientovaných zpráv a prezentací.

ACD/ChemSketch je vybaven následujícími funkcemi:

- **Structure Mode** (Strukturální mód) pro kreslení chemických struktur a výpočet vlastností znázorněných molekul.
- **Draw Mode** (Kreslení) pro editaci textu a grafiky.
- **Molecular Properties** (Molekulové vlastnosti) pro výpočet a předpověď:
 - * Molekulové hmotnosti (formula weight);
 - * procentového zastoupení prvků (percentage composition);
 - * molární refraktivity (molar refractivity);
 - * molárního objemu (molar volume);
 - * parachoru;
 - * indexu lomu (index of refraction);
 - * povrchového napětí (surface tension);
 - * hustoty (density);
 - * dielektrické konstanty (dielectric constant);
 - * polarizability;
 - * monoisotopické, nominální a průměrné molekulové hmotnosti.

ACD/ChemSketch může být používán jako takový (stand alone) jako editor chemických struktur anebo jako grafický editor či sloužit jako vstupní portal pro jiné programy ACD jako například program pro predikci NMR spekter (NMR Predictor engines).

1.2 Další moduly

Existují další moduly ACD software, které jsou přístupné přes ChemSketch interface, pomocí tlačítek na liště nástrojů. Tyto položky, jejichž počet roste s každou verzí či upgrade, jsou k dispozici jako dodatečné moduly a mohou být považovány za oddělené programové celky. Pokud se o ně zajímáte kontaktujte ACD, nebo svého regionálního dealera (SciTech sro) prostřednictvím Webu či e-mailu.

- **ChemBasic** — je speciálním programovacím jazykem, který umožňuje úpravy ACD software (může být downloadován z <http://www.acdlabs.com>). Viz též kap. 13, "Goodies", kde jsou uvedeny příklady programování v ChemBasic pro ChemSketch.
- **ACD/I-Lab** — je Internetovou službou, která umožňuje přímé využití chemických databází a předpovědi vlastností molekul (látek) bez toho aby měl uživatel příslušné programy instalovány na svém počítači. V případě zájmu si lze otevřít účet Interactive Lab přímo na

<http://www.acdlabs.com/ilab>. Stává se, že ACD umožní určitou periodu využití těchto služeb z marketingových důvodů zdarma, nebo umožní demo-náhled jako hostování (guest). ChemSketch 4.0 a vyšší mohou vstupovat do I-Lab automaticky, pokud PC na kterém je instalován je připojen k Internetu. Viz kap. 4 pro podrobnější vysvětlení.

- **ACD/Tautomers** — prověří nakreslenou strukturu a generuje nejpravděpodobnější tautomerní formy organických struktur (je obsažen jak v freewareové I v komerční verzi ChemSketch). Viz. kap. 12.2 pro další detaily.
- **ACD/Dictionary** — je program k vyhledávání molekulární struktury běžných biologicky aktivních látek podle jejich názvů. ACD/Dictionary obsahuje více než 85 tisíc systematických a dalších pojmenování nejběžnějších chemicky a biologicky důležitých látek. Data pokrývají více než 200 terapeutických skupin a inhibitorů více než 500 různých enzymů (database je k dispozici pouze v komerční verzi). Viz. kap. 12.3 pro další informace.
- **Novinka! ACD/Name Freeware** — generuje název podle doporučení IUPAC v rámci názvoslovných pravidel pro organickou, biochemickou a anorganickou nomenklaturu. Tento nástroj je distribuován jako add-on k ChemSketch, zdarma. Viz. kap. 12.4.

Následující funkce, representované “tlačítky na liště nástrojů” musí být k programu ACD/ChemSketch dokoupeny extra:

- **ACD/Boiling Point and Vaporization** — vypočte přesnou teplotu varu při tlaku mezi 0,001 mm Hg a 10 atm, ve většině případů s přesností větší než ± 10 °C, přímo pro látku, jejíž struktura je nakreslena v okně ChemSketch. Tato funkce je popsána ve zvláštním manuálu *ACD/Boiling Point & Vapor Pressure Calculator User's Guide*.
- **ACD/Sigma** — zobrazí Hammettovský či příbuzný parametr pro různé substituenty sloučeniny nakreslené v okně ChemSketch. Tato funkce je popsána ve zvláštním manuálu *ACD/Sigma User's Guide*.
- **ACD/Name to Structure** — generuje molekulovou strukturu pro téměř libovolnou látku z názvu napsaného do funkčního okna programu. ACD/Name to Structure zvládne většinu organických látek a mnoho látek přírodních, vč. jejich derivátů, podle IUPAC v rámci názvoslovných pravidel pro organickou, biochemickou a anorganickou nomenklaturu. Tato funkce je popsána ve zvláštním manuálu *ACD/Name to Structure User's Guide*.

1.3 Co je nového ve verzi 5.0

Pokud jste novými uživateli programů ACD, doporučujeme abyste se seznámili s příklady popsanými v následujících kapitolách. Na duhou stranu předpokládáme, že pokud jste zakoupili (či chcete zakoupit) toto software jako upgrade, jste již se základními funkcemi seznámeni a tato sekce může sloužit jako výčet nejnovějších funkcí a rysů programu.

1.3.1 Obecné funkce programů ACD/Labs



- Všechny součásti a programy z ACD software jsou funkční jako 32-bitové aplikatce na PC s operačními systémy Windows 95/98/NT/ME/2000, s výjimkou produktů ACD/I-Lab for Intranets, Batch for the SGI a Batch for Sun Solaris.
- Všechny programy ACD software běžící na PC jsou ovládány ACD/Host, což umožňuje nastavení funkcí a parametrů loading, timeout a auto-reload.
- Všechny PC verze ACD software (s výjimkou PhysChem Batch, LC Simulator a GC Simulator) zahrnují nové funkce, které automaticky detegují přednastavené (default) asociace souborů podle extensí, které jsou specifické pro ACD software (e.g. .sk2, .esp, .lud). Od verze 5.0, většina ACD oken obsahuje nabídku **File Associations...** (**File** menu).

- Všechny verze PC programů ACD mají novou nabídku v **Help** menu: **Bug Report / Feature Request**. Pokud používáte program na PC připojeném k Internetu, tato funkce spojí váš počítač s URL ACD web pro hlášení chyb a problémů (bug reports) a požadavky na nové funkce programu (new feature requests).
- Nová funkce všech input/output dialogů ve všech oknech verzí 5.0 umožňuje změnu velikosti standardních dialogových oken **Select File** (pravý spodní roh dialogového okna). Navíc, manipulace se soubory a složkami (file / folder), jako zakládání nových složek, čištění plochy desktop, zobrazení podrobností o souboru jsou dosažitelné přímo z dialogového okna.
- ♦ Všechny programy ACD pro PC mohou být updatovány *via* Internet, za použití Online Update facility. Viz kap. 1.9.3 dále.

1.3.2 Funkce specifické pro ChemSketch

- Nyní lze zapisovat soubory ChemSketch ve formátu PDF, vhodném pro spolupráci s programem Adobe Acrobat Reader a pod.
- Můžete exportovat struktury ve formátu Chemical Markup Language (CML).
- Konvertovat řetězce SMILES (strings) na struktury a konvertovat struktury na řetězce SMILES. (Stereochemické deskriptory jsou zatím vyloučeny.)
- Mohou být vypočteny molekulové hmoty a to nejen průměrné ale i pro nejobvyklejší isotop.
- Online "Instructions for Authors" byly rozšířeny a doplněny o nejnovější informace pro oblíbené časopisy.
- Přibyly nové šablony (templates), řada jich byla vylepšena.
- Nový modul — ACD/Name Freeware — je k dispozici na nástrojové liště, viz kap. 12.4.
- 3D rotační konvence je nyní stejná jako ta, kterou používá ACD/3D Viewer.



1.4 Co bylo nového ve verzi 4.5

- **Znaménko plus pro chemické reakce**  a **reakční šipky**  mají tlačítka přístupná přímo v módu kreslení struktur (Structure mode). Nemusíte přepínat do módu kreslení obrázků (Draw) abyste je nakreslili.
- Nová tabulka **Reaction** v dialogu **Preferences (Options menu)** dovoluje výběr mezi možnostmi, poskytnutými znaménky pro chemické reakce a šipky.
- Grafické objekty (vytvořené v kreslicím módu (Draw)) mohou být vybrány a posunovány i v módu kreslení struktur. To umožňuje vytváření komplexních grafických projektů. Tuto funkci použijeme tak, že vybereme volbu **Select Graphics** v tabulce **Structure** v dialogu **Preferences** v menu **Options**.
- Ovládání stereo-konfigurací je možné i při použití funkcí **Clean** a **Flip**. Vyberte **Options** menu zvolte **Preferences** a pak proveďte volbu ve spodní části tabulky **Structure**.
- Byly implementovány další strukturní formáty souborů pro import: soubory ChemDraw CDX (*.cdx) a REACCS RXN (*.rxn). RXN formát je též podporován při exportu.
- Jako volitelné funkce, které je možno dokoupit byly naprogramovány do okna ChemSketch — ACD/Name to Structure (viz kap. 1.2).
- ACD/I-Lab add-on umožňuje přístup k predikčním modulům ACD via Internet. Viz <http://www.acdlabs.com/ilab>. I-Lab can může být dosažen automaticky pokud je PC připojeno k Internetu. Viz kap. 4.

1.5 Tento průvodce

K tomu, abychom začali používat ACD/ChemSketch s využitím všech jeho možností nemusíte číst žádný návod. Program je jednoduše ovladatelný a intuitivní. Také z tohoto důvodu neposkytuje tento návod vyčerpávající popis všech možností ale ponechá na vašem experimentování jak jej využijete. Poté, co se seznámíte s řadou cvičení poznáte, že používat ACD/ChemSketch je snadné a že nebudete potřebovat další pomoc v jeho plném využití.

Skoro všechny kapitoly tohoto návodu si můžete přehrát jako „video“ v **animované podobě** pod LotusCam®, jež lze získat na Web stránkách ACD. (Filmy jsou obvykle obsaženy I na instalačním a demo CD.)

- ⇒ Tento návod je dodáván v elektronické podobě, čitelné s běžným textovým editorem. Pokud byste snadno nenalezli to, co hledáte, použijte funkci Najít/Search z editoru, který používáte.
- ⇒ Typické obrázky znázorňující okna a funkce z obrazovky počítače jsou často zmenšeny. Základním zobrazením příručky je okno editoru roztažené na celou obrazovku. Klikněte na knoflík minimalizovat  (pravý horní roh okna) a získáte obrázek menší, klikněte na knoflík maximalizovat  a obraz se roztáhne na celou obrazovku.
- ⇒ Snahou vydavatele je používat zobrazení funkcí z co nejposlednější verze programu. Je však přirozené, že vzhledem k prudkému vývoji, můžete najít určité rozdíly.
- ⇒ Tento návod předpokládá, že dovedete zacházet s myší a soubory v rámci Microsoft Windows.



Vyhrajte!!!
Váš názor je
pro nás
důležitý.


Jakmile se seznámíte s tímto návodem, pamatujte, že bychom rádi měli váš názor na něj. Zajímá nás jak vylepšit dokumentaci k tomuto produktu. Budeme rádi, když vyplníte malý dotazník. Řádné odpovědi budou slosovány v soutěži o ACD/ChemFolder (či ekvivalentní slevu na ACD software). Použijte prosíme MS Word 6.0 či pozdější k vyplnění „survey.doc“ nebo Adobe Acrobat Reader k otevření „survey.pdf“ na vašem instalačním CD, nebo navštivte stranu „Feedback“ na Web site:

<http://www.acdlabs.com/feedback/guides.html>. Vítěz bude oznámen koncem každého kalendářního roku.

Připomínky k českému překladu pište na scitech@scitech.cz.

1.6 Užitečné definice

V tomto návodu budeme používat následující termíny pro popis určitých akcí:

- ⇒ **Ukázat (Point)** znamená umístit kurzor (ukazovatel) myši  na určitý objekt.
- ⇒ **Kliknout (Click)** znamená umístit kurzor myši na objekt a zmačknout levé tlačítko myši prstem, aniž myší pohneme.
- ⇒ **Pravý klik (Right-click)** znamená umístit kurzor myši na objekt a zmačknout pravé tlačítko myši prstem, aniž myší pohneme.
- ⇒ **Dvojitý klik (Double-click)** umístit kurzor myši na objekt a zmačknout levé tlačítko myši dvakrát za sebou prstem, aniž myší pohneme.
- ⇒ **Přetahnout (Drag)** znamená umístit kurzor myši na objekt a zmačknout levé tlačítko myši prstem, a držet je zmačknuté zatímco pohybuje myší (kursorem).

Pozn. Ve Windows je předvolena myš „pro praváky“, tj. jak je výše popsáno. Abychom změnili logické strany navštívíme **Windows Control Panel**, zvolíme **Mouse** a provedeme změnu, kterou chceme. (Včetně změny rychlosti nutné pro platné dvojité kliknutí.)

1.7 Demo verze

Při prvním použití demo verze programu bude zobrazeno upozornění, že jde o ACD Demonstration software. Občas se takovém upozornění může objevit i během používání.

Demo verze ACD/Labs programů mají **některá funkční omezení** jako např. v případě funkcí Save, Copy, Cut, Paste a Print features. Při pokusu použít takovou funkci v demo verzi bude zobrazeno upozornění, že operace není povolena.

Pokud potřebujete vědět více o omezeních ve vaší verzi programu, buďte tak laskavi a kontaktujte nás. Většinu funkcí však ke své spokojenosti budete schopni plně používat.

1.8 Freeware verze

Od dubna 1999, umožnila firma Advanced Chemistry Development použití freewarové verze ChemSketch, prostřednictvím “Free Stuff” linku na svém Web site.

Pozn. ACD/ChemSketch freeware musí být nainstalován do svého odděleného podadresáře. Tento podadresář může obsahovat podobné freewarové programy ACD jako ACD/SpecViewer, ACD/CNMR Viewer, ACD/HNMR Viewer, atd. leč **nesmí obsahovat žádnou část řádně zakoupené verze ACD software.**

ACD/ChemSketch Freeware verze 5.0 obsahuje několik vylepšení od verze minulé. Obsahuje většinu funkcí „ostré“ verze 5.0. Následující tabulka srovnává freewarovou a komerční verzi ChemSketch 5.0:

Program	Freeware	Plná verze
ACD/Tautomers	√	√
ACD/Name Freeware	√	√
ACD/3D Viewer	√	√
ACD/I-Lab add-on	√ (nutno instalovat ¹)	√
Instructions for Authors	√ (nutno instalovat)	√
Export to Adobe PDF	není	√
ACD/Dictionary	není	√
Technical Support	není	√

Pozn. Přeztože ACD/ChemSketch freeware nemá k dispozici technickou podporu firmy, doporučujeme vám stejně navštívit ChemSketch newsgroup na adrese uvedené v další kapitole a dotázat se tam na vše co by vás trápilo či sdílet vlastní tipy.

¹ Uvědomujeme si, že by zřejmě bylo výhodnější pro některé uživatele umožnit download všech součástí v jednom balíku leč mnoho jiných by to nepotěšilo. K dispozici je tudíž „po kouskách“.

1.9 Pro další informace...

1.9.1 Web Site – webová adresa

Seznamte se s současnou nabídkou software a služeb ACD na webové straně
<http://www.acdlabs.com> (Evropa: <http://www.acdlabs.co.uk>)

Webová strana ACD je navštěvována desítkami tisíc spojení za den. Je zde zřejmě důvod pro takovou frekvenci: webové stránky ACD nabízejí mnoho. Od jara roku 2001, tyto stránky nabízejí zdarma plné verze ChemSketch, ISIS 3D Add-in, ChemDraw extensions a zcela zdarma 2-týdenní demo klíč k "Interactive Lab" kde může každý zájemce zkusit vypočítat potřebná data za použití Java appletů bez nutnosti nákupu software. Dále jsou zde projekce pro Lotus Cam, které ukazují použití většiny softwarových aplikací ACD (zvl. ChemSketch).

Informace na webových stránkách ACD jsou stále doplňovány a upřesňovány. Můžete zde zjistit i kde lze pracovníky ACD potkat (konference, semináře, výstavy). Můžete zabrousit i do Frequently Asked Questions anebo zde nechat dotaz či si "popovídat" v ACD newsgroup.

Pokud si přejete být informováni o nejnovějších událostech v oblasti chemického software ACD, nezapomeňte se zapsat na:

<http://www.acdlabs.com/feedback/mailing.html>

Pokud se chcete zúčastnit ChemSketch newsgroup, pak na straně:

<news://news.acdlabs.com/acd.public.chemsketch>

1.9.2 Jak kontaktovat ACD

Můžete použít webové strany, telefon, fax anebo běžnou poštu, nicméně nejobvyklejší je to pomocí elektronické pošty. Dotazy na ceny, nákup, dostupnost verzí a dotazy obecné adresujte na

info@acdlabs.com.

Technické a vědecké dotazy adresujte na

support@acdlabs.com.

Pokud budete mít konkrétní dotaz, nezapomeňte nám vždy sdělit jméno toho, kdo program koupil a registroval, číslo verze a datum zhotovení (release date) a název konkrétního produktu o který jde. (Většinu těchto informací najdete ve vlastním programu pod možností Help/About.) Pokud to víte, je podstatné i uvedení prodejce programu.

1.9.3 Online Updates—Novinka verze 5.0!

Verze 5.0 všech PC-based ACD programů obsahuje možnost získání software updates přes internet (online). K tomu budete muset znát registrační čísla software a budete muset mít živé Internetové připojení z počítače na kterém je daný program instalován. Updates jsou malé opravy programů a obvykle se poznají podle změny poslední cifry čísla verze, jako např. 5.00 na 5.01. Prostudujte si kapitolu "Online Updates", která je v dokumentaci, kterou jste dostali spolu s příslušným produktem anebo pošlete e-mail technickému oddělení ACD.

2. Základy ACD/ChemSketch

2.1 V kapitole probereme

Tato kapitola seznámí čtenáře s tím jak

- program otevřít;
- určit a změnit přiřazení souborů;
- nastavit předvolené podadresáře;
- základní moduly ChemSketch, jmenovitě Structure a Draw mody; a
- jako ChemSketch ukončit.

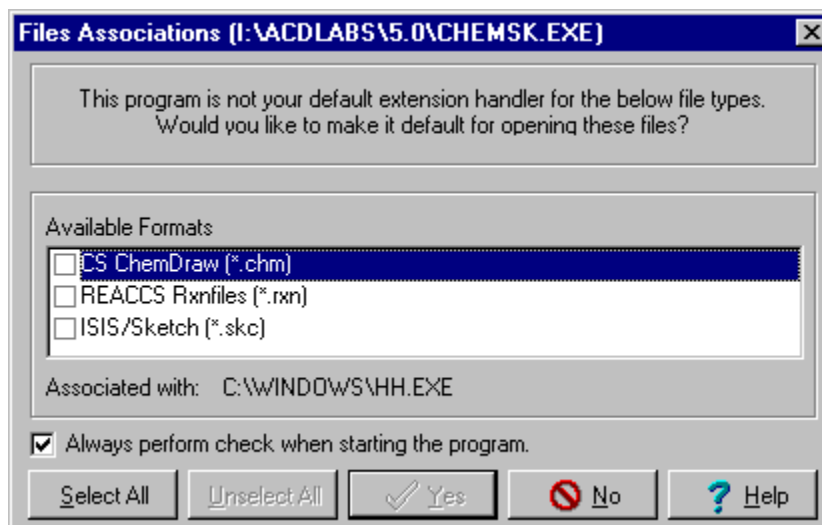
2.2 Startujeme s ACD/ChemSketch

Poté co jste nainstalovali ACD/ChemSketch na svůj počítač použijte následující návod k jeho otevření:

1. Nastartujte Microsoft Windows.
2. Dvakrát klikněte na ikonu ChemSketch.
–NEBO–
Z nabídky **Start/Run** z Windows 95/98/2000/ME či NT vyberte **ACD/Labs** a zvolte ikonu ChemSketch.
–NEBO–
Dvakrát klikněte na soubor "chemsk.exe" v podadresáři ve kterém máte ACD software instalován. (Měk by to obvykle být ACD50).
–NEBO–
Pokud máte otevřen jiný program ACD/Labs pak z nabídky **ACD/Labs** vyberte **ChemSketch**.
3. Uvidíte úvodní obrázek. Pokud je váš program freeware, uvidíte okno **ACD/Labs Products**. Klikněte **OK** aby se zavřelo. Pokud chcete tento dialog potlačit při dalším otevírání programu zvolte **Help > ACD/Labs Products...** a vyprázdněte zaškrtačací okénko **Show this Screen at Startup**.
- 4.

2.3 Nastavení přidružených souborů—**Novinka ve verzi 5.0!**

1. Jakmile otevřeme poprvé po instalaci program objeví se dialogové okno **File Association** pro nastavení přidružených souborů.



2. Toto okno obsahuje výběr přípon souborů odpovídající typům souborů některých verzí editorů chemických vzorců — CS ChemDraw (*.CHM), REACCS Rxnfiles (*.RXN), ISIS/Sketch (*.SKC) a případně i další. Pokud budete chtít aby byly takové soubory v budoucnosti přednostně otevírány tímto ACD programem zaškrtněte prázdné čtverečky u každého takového typu a poté klikněte na knoflík **Yes**.
3. Pokud nechcete aby se tak dělo, anebo si nejste jisti, že víte co děláte, nechte zaškrťovací čtverečky prázdné a klikněte na knoflík **No**.
4. Poté se vám objeví na obrazovce **Tip of the Day**, který můžete vypnout, jakmile jej přečtete.

2.3.1 Změna přidružení souborů

Pokud jste nezvolili všechny formáty, aby se staly přidruženými k programu ChemSketch můžete zobrazit a změnit základní nastavení této funkce tak, že otevřete nabídku **File** a zvolíte **File Association**. Pokud jste zvolili všechny formáty bude vám oznámeno, že všechny typy jsou již přidruženy (all supported file types are already associated with the current application). V takovém případě můžete změnit nastavení v programu **Windows Explorer**.

1. Otevřete Windows Explorer, vyberte soubor s příponou, jejíž nastavení chcete změnit.
2. Podržte klávesu SHIFT a klikněte pravým tlačítkem myši na soubor. Z nabídky vyberte **Otevřít v programu (Open With...)**
3. Nastavte program, který bude soubory tohoto typu otevírat a zaškrtněte volbu **K otevření těchto souborů vždy použít tento program (Always use this program...)**.
4. Klikněte na **OK** a zavžete Windows Explorer.

2.4 Změna předvoleného podadresáře

Pokud používáte jednouživatelskou (stand-alone) verzi ChemSketch, je předvolený adresář s největší pravděpodobností správně.

Pokud používáte síťovou verzi je doporučené změnit předvolený podadresář v ACD/Labs

software tak, že předvolený zapisovací disk k uchovávání rozdělané práce bude váš lokální pevný disk a nikoli server. Poté, co vytvoříte místní přístup pro omezený či nelimitovaný počet uživatelů nastavte tuto funkci u každého uživatele.:

1. V otevřeném okně ChemSketch vyberte z nabídky **Options** možnost **Preferences**.
2. Klikněte na možnost **General**. V okně Default na spodku okna specifikujte adresáře pro **Import, Open, Save, Export** v dialogovém okně ChemSketch:



Pozn. V možnosti **Private** můžete nastavit podadresář pro záznam vlastních konfiguračních souborů pro ChemSketch program (jako soubory šablon template.cfg a stylů qrstyles.stl).

1. Klikněte **OK**.

2.5 Módy *structure* a *draw*

Když začnete pracovat s ACD/ChemSketch zjistíte, že hodně povelů a tlačítek na lištách je šedých a neaktivních. Stanou se aktivními ihned, jakmile nakreslíte prvou strukturu.

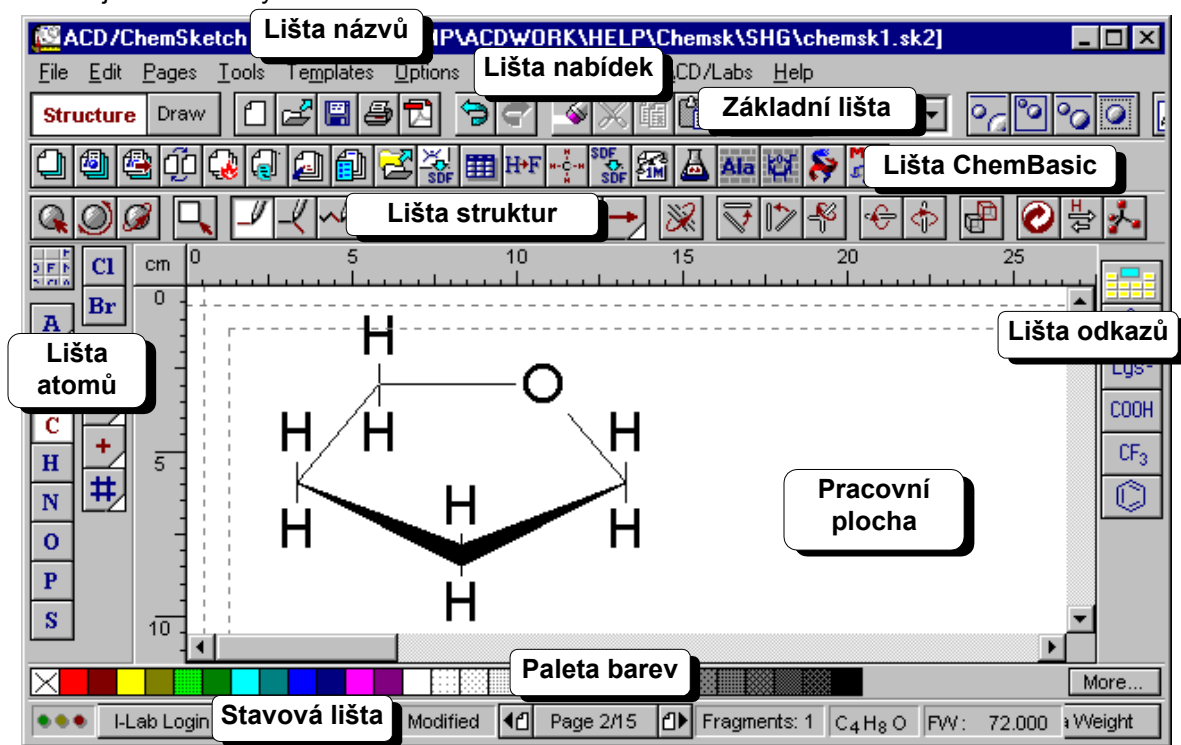
V okně ChemSketch je možno pracovat ve dvou módech, módu kreslení struktur **Structure** a módu kreslení obrázků **Draw**. Můžete snadno přepínat mezi oběma módy přepínačem umístěným v levém horním rohu:



V módu Structure se kreslí strukturální chemické vzorce a reakční schemata a v módu Draw nalezneme nástroje pro kreslení grafických objektů a popisování těchto objektů i vytvořených struktur.

2.5.1 Okno módu Structure

Na obrázku je základní okno módu Structure. Názvy a polohy lišt, které se používají v celém návodu jsou označeny.



Lišta názvů (Title bar) ukazuje název programu a otevřeného souboru. Předvolený název souboru je NONAMExx.SK2, kde 'xx' je počítadlo. SK2 je přípona souboru vytvořeného programem ChemSketch či programem příbuzným.


Lišta nabídek (Menu bar) obsahuje řadu slov. Každé slovo je spojeno s nabídkou ('menu') příbuzných povelů pro práci v okne ChemSketch v módu Structure.

Základní nabídka (General toolbar) umístěná přímo pod lištou nabídek obsahuje nástroje společné módu Structure a Draw a slouží k provádění operací jako: uschování, otevírání soubodů, návrat na předchozí operaci (undoing/redoing), kopírování a vkládání (copying a pasting), zvětšování a zmenšování (zooming in / out), a vkládání obrázků z šablon.

Lišta ChemBasic pod základní nabídkou je volitelná a obsahuje tzv. Goodies a další operace napsané v programu ChemBasics. Pro další informace o této možnosti viz kapitolu 13.

Lišta struktur umístěná nad pracovní plochou je zobrazena pouze v módu Structure. Tato lišta obsahuje nástroje pro kreslení chemických struktur a jejich úpravy.

Lišta atomů zobrazená svisle na levé straně pole obsahuje klávesy odpovídající atomům a nástroje na úpravu jejich vlastností (náboj (charge), vaznost (valence), číslování (numbering), atd.).

Lišta odkazů umístěná svisle vpravo obsahuje tabulku substituentů (Table of Radicals) a různé klávesy představující předpřipravené substituenty a substrukury z tabulky. U plné verze (tj. nikoli u freewarové) je na tomto místě umístěna klávesa encyklopedie ACD/Dictionary  nad tabulkou substituentů. Encyklopedie obsahuje popis 85 tisíc biologicky aktivních látek spolu s jejich kopírovatelnými strukturami.

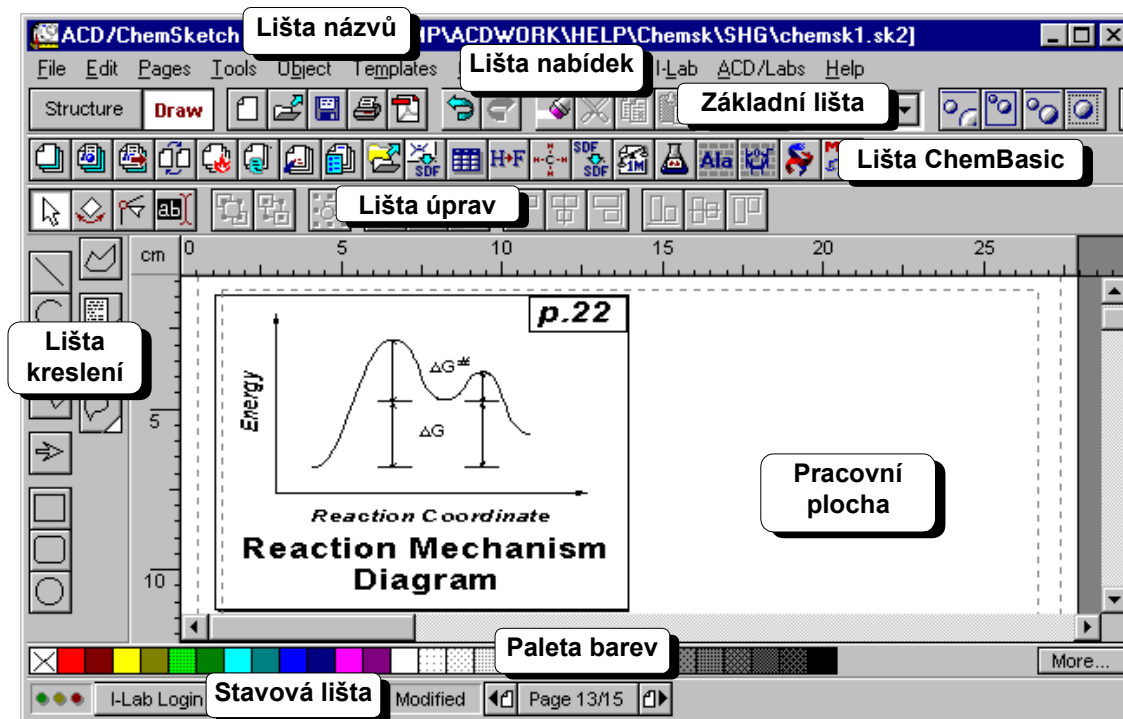
Pracovní prostor (Workspace) je volná plocha uprostřed na které se vytvářejí obrazce a struktury. (Viz. obrázek)

Paleta barev na spodním okraji umožňuje rychle změnit barvu atomů a vazeb ve vybraných chemických strukturách (kliknutím či kliknutím pravým tlačítkem myši na příslušnou barvu).

Stavová lišta obsahuje informace o tom co může být v daný moment užitečné: jméno SK2 souboru se kterým pracujeme, číslo strany v SK2 souboru, počet fragmentů (chemicky nespojených struktur) na pracovní ploše, sumární vzorec (molecular formula) vybrané struktury, a zvolenou chemickou vlastnost zvolené struktury. Dále obsahuje klávesu, která zprostředkuje automatické připojení k webovému centru I-Lab u počítačů připojených na Internet.

2.5.2 Okno módu Draw

Níže je uveden příklad okna v módu kreslení (Draw). Názvy a polohy lišt, které se používají v celém návodu jsou označeny.



Lišta názvů (Title bar) ukazuje název programu a otevřeného souboru. Předvolený název souboru je NONAMExx.SK2, kde 'xx' je počítadlo. SK2 je přípona souboru vytvořeného programem ChemSketch či programem příbuzným.

Lišta nabídek (Menu bar) obsahuje řadu slov. Každé slovo je spojeno s nabídkou ('menu') příbuzných povelů pro práci v okne ChemSketch v módu Draw.

Základní nabídka (General toolbar) umístěná přímo pod lištou nabídek obsahuje nástroje společné módu Structure a Draw a slouží k provádění operací jako: uschování, otvírání souborů, návrat na předchozí operaci (undoing/redoing), kopírování a vkládání (copying a pasting), zvětšování a zmenšování (zooming in / out), a vkládání obrázků z šablon.

Lišta ChemBasic pod základní nabídkou je volitelná a obsahuje tzv. Goodies a další operace napsané v programu ChemBasics. Pro další informace o této možnosti viz kapitolu 13.

Lišta úprav (Editing toolbar) pod základní nabídkou je zobrazen pouze v módu Draw. Obsahuje nástroje na kreslení grafických objektů a jejich úpravy.

Lišta kreslení (Drawing toolbar) je umístěna svisle na levém okraji plochy a obsahuje klávesy pro kreslení grafických objektů a textových polí.


Pracovní prostor (Workspace) je volná plocha uprostřed na které se vytvářejí obrazce a struktury. (Viz. obrázek)

Paleta barev na spodním okraji umožňuje rychle změnit barvu vybraných objektů (kliknutím či kliknutím pravým tlačítkem myši na příslušnou barvu).

Stavová lišta obsahuje informace o tom co může být v daný moment užitečné: jméno SK2 souboru se kterým pracujeme, číslo strany v SK2 souboru.

2.6 Ukončení práce s ChemSketch

Práci můžete ukončit jedním z těchto způsobů:

- kliknout na  v pravém horním rohu lišty názvů programu ChemSketch v libovolném okně;
- NEBO -
- v nabídce **ACD/Labs** zvolit **Close All**. Tento povel způsobí, že se program pokusí zavřít všechny otevřené programy ACD, jeden po druhém.
- NEBO -
- zvolit **Exit** v nabídce **File**. Tento povel zavře pouze ten program v jehož nabídce jsme povel zvolili.

Program se vás zeptá, zda si přejete uschovat vaši práci v odpovídajícím formátu s ohledem na okno ze kterého odcházíte.

3. Kreslení jednoduchých struktur

3.1 V kapitole probereme

Tato kapitola informuje o základech kreslení chemických struktur v módu Structure. Cílem kapitoly je poskytnout čtenáři přehled o možnostech editoru chemických struktur ChemSketch. Naučíme se:

- kreslit atomy a vazby (jednoduché, dvojitě, trojně; klínové, koordinační, nedefinované) a sumární fragmenty (labels);
- převracení nakreslené molekulové struktury;
- vybrat, otáčet a měnit velikost nakreslené molekulové struktury;
- převést nakreslené dílo na počítačový soubor, vložit do textového dokumentu a vytisknout jej na tiskárně; a navíc
- vyčistit obrazovku.



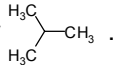

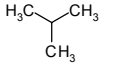

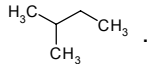
Kreslení vazeb a atomů je základní činnost na pracovní ploše ChemSketch. Práci zahájíme tím, že se přesvědčíme, že pracujeme v módu Structure tak, že přepínač ke v poloze:



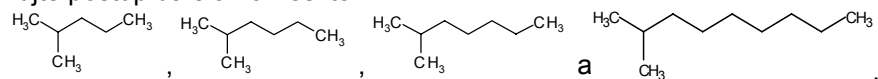
3.2 Kreslení atomů, vazeb a substituentů

3.2.1 Použití nástroje běžného kreslení (Draw Normal)

Nástroj pro běžné kreslení je předvolený aktivovaný nástroj v okamžiku otevření programu. Nástrojem snadno nakreslíme vazby normální i rozvětvené a můžeme zde i nahradit nakreslené atomy jinými atomy z periodické tabulky prvků.

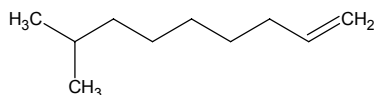
1. Klikněte na nástroj **Draw Normal**  a pak na atom uhlíku **C**  na liště atomů.
2. Kliknutím do prázdného pole pracovní plochy nakreslí methan CH₄.
3. Kliknutí na CH₄ přidá methyl -CH₃, a vytvoří CH₃-CH₃ se standardní délkou vazby. Klikněte na ten samý uhlík dvakrát a přibudou na něm dvě methylové skupiny .
4. Klikněte na knoflík **Set Bond Vertically**  na liště struktur a pak na libovolnou vazbu ze struktury aby program umístil vzorek tak, že zvolená vazba bude svisle: .
5. Klikněte na knoflík **Draw Normal**  na liště struktur.
6. Klikněte na uhlík nejvíce vpravo a prodloužíme zvolený methyl na ethyl .

7. Opakujte postup dale a nakreslíte:

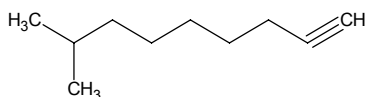


3.2.2 Dvojně a trojně vazby

1. Na naposledy nakreslené struktuře klikněte (nikoli na uhlík) ale na poslední vazbu. Stvoříte tak dvojnou vazbu:






2. Kliknete-li na vazbu ještě jednou, stvoříte vazbu trojnou:



3. Klikněte na ni znovu a z trojně bude zase jednoduchá.


3.2.3 Odstranění jednotlivých atomů

Dejme tomu, že jste přidali více atomů než bylo třeba, můžete je odstranit po jednom.

1. Klikněte na knoflík s gumou **Delete** .
2. Klikněte na atom který chcete odstranit ze své treningové molekuly a on zmizí. Můžete pokračovat dále, pokud je tlačítko **Delete**  stisknuto. Chcete-li se vrátit ke kreslení, klikněte na knoflík **Draw Normal** .

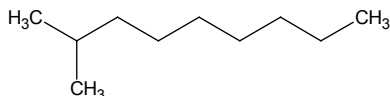
3.2.4 Povel k návratu do předchozího stavu (Undo)

Máte k dispozici ještě jednu možnost jak se vrátit před operaci, kterou jste nemeěli udělat.

1. Klikněte na knoflík **Undo** . Tento povel změní pracovní plochu ChemSketch do podoby, ve které byla před poslední úpravou, kterou jste udělali.


Pozn. Jakmile kliknete na knoflík **Undo** aktivuje se jeho protipól **Redo**, který vrací pracovní plochu před předchozí povel **Undo**.

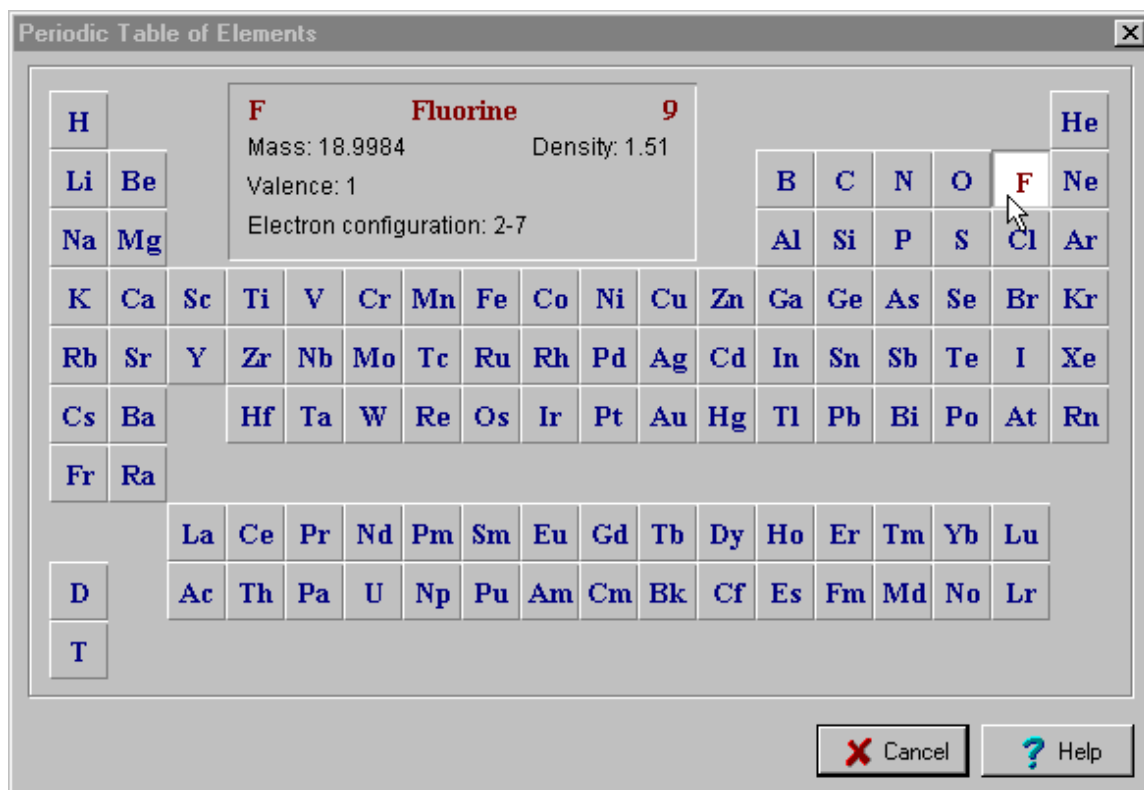
2. Klikněte na knoflík **Undo** několikrát až se vaše treningová struktura vrátí na:



Pozn. Povel **Undo** lze opakovat až 50-krát. Nicméně, pokud začnete konstruovat složitější struktury a objekty je doporučenější, abyste si záhy zvykli zapisovat svou práci vždy po několika změnách.

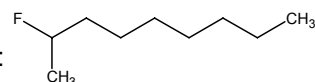
3.2.5 Měnění atomů

1. Klikněte na knoflík **Periodic Table**  na liště atomů. Otevře se vám **Periodická tabulka prvků**:



2. Klikněte na knoflík **Fluor**  v tabulce. Povšimněte si, že knoflík atomu **Fluoru** se objevil na liště atomů.




3. Klikněte na uhlík nejvíce nalevo a on bude nahrazen fluorem:



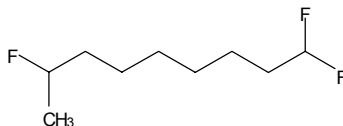
Pozn. Pokud zvolíte nový prvek z periodické tabulky objeví se vám jeho knoflík na liště atomů. Abyste jej odstranili, klikněte dvakrát na jeho knoflík, nebo klikněte dvakrát na lištu atomů a potvrďte volbu **Yes**. Tato akce odstraní všechny atomy s výjimkou těch, které jsou předvoleny autorem.

3.2.6 Nástroj souvislého kreslení (Draw Continuous)



Pokud je aktivována funkce souvislého kreslení mohou být vazby přidávány pouze na označený atom. Abychom atom označili stačí na něj kliknout. Tento mód je užitečný pokud chceme přidávat substituenty na týž atom anebo když chceme provést delší spojovací vazbu ve složitě struktuře.

1. Klikněte na knoflík **Draw Continuous**  na liště struktur. Alternativně, můžete stisknout pravý knoflík myši abyste spustili tento mód kreslení. (Další kliknutí vás vrátí do **Draw Normal**  módu; oba módy lze pravým tlačítkem myši přepínat.)
2. Ujistěte se, že je stisknut knoflík atomu **Fluoru** .

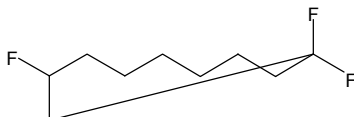
3. Klikněte na atom uhlíku nejvíce vpravo ve vaší treningové struktuře abyste jej vybrali. Klikněte na něj podruhé a struktura se prodlouží o C-F vazbu. Klikněte na něj dvakrát a prodlouží se ještě jednou o druhý fluor:




3.2.7 Kreslení tažením myši

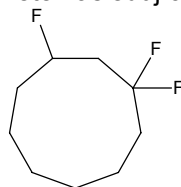
V obou módech, jak v **Draw Normal**  tak v **Draw Continuous** , tažení myši se stisknutým levým tlačítkem (dragging) od jednoho atomu ke druhému nakreslí jednoduchou vazbu mezi nimi (ikdyž vazba neodpovídá zvoleným parametrům běžné vazby [délka, úhel aj.]). Pokud tahnete do nebo z volného prostoru je programem přidán atom (jehož tlačítko je stisknuto) na volný konec vazby, kterou jste nakreslili.


V jednom z módů, buď **Draw Normal** nebo **Draw Continuous** klikněte na jeden z terminálních atomů uhlíku a aniž byste pustili stisknuté levé tlačítko myši tahněte nad druhý terminální atom uhlíku a pak teprve tlačítko pusťte. Nakterslíte cyklickou strukturu:



3.2.8 Vyčištění (Cleaning) struktury

Klikněte na tlačítko **Clean**  na liště struktur. Povel způsobí, že editor zkusí převést všechny vazby na standardní délky a vazebné úhly ve vaší struktuře (což se u složitějších obrazců nemusí povést k vaší spokojenosti) tak, že dostanete následující:

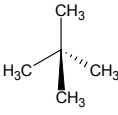
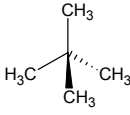


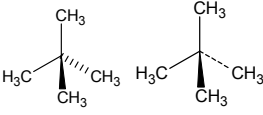
Pozn. Povel **Clean**  je naprogramován tak, aby standardizoval všechny vazebné délky a úhly tak aby struktura hezky vypadala — v řadě případů jsou struktury i chemicky „správnější“. Například u acyklických fragmentů umístí vazby na sp^2 uhlících tak, aby zaujímaly úhel 120° a vazby u uhlíku sp 180° (lineární). Pokud použijete při tvorbě struktur geometrickou a prostorovou izomerii Clean tyto rysy zachová. Nebudete ale spokojeni např. se strukturou steroidů či cukrů, protože chemici mají pro jejich kreslení jiný pocit „pěkného“ než počítač.




3.2.9 Použití prostorových koordinačních a nedefinovaných vazeb

Můžete kreslit širokou paletu druhů vazeb vedle běžných čárových spojů:

- prostorové (stereo) vazby obrácené od vás ; (pozn. překl. tento symbol může vést k nedorozumění pokud není používán homogenně tak, že na zúženém místě je centrální atom a klínek směřuje od něj dozadu; je pravdou, že geometrické cítění by mohlo vést k opačnému použití tak, aby „geometricky“ klínek odpovídal pojmem „vepředu a vzadu“


klínku plného. Tetrahedrální molekula vypadá pak  a nikoli . Pro odstranění této geometrické obtíže doporučuje IUPAC použití spojnice tvořené krátkými rovnoběžnými čárkami kolmými na vazbu samu. Někdy se používá i jednoduchá vazba čárkovanou spojnicí (což norma IUPAC nedovoluje neb symbol je vyhrazen pro

znázornění částečné vazby *pozn. překl.*). . Program ChemSketch umožňuje příslušnou změnu tak, že se při klikání na prostorovou vazbu její modifikace střídají.)

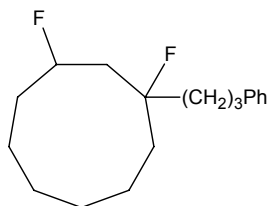
- prostorové (stereo) vazby obrácené k vám ;
- vazby koordinační ;
- a vazby s nedefinovanou stereochemií .

Zvolte kterýkoliv z uvedených nástrojů a klikněte na kteroukoliv vazbu v nakreslené struktuře. Na prostorovou či koordinační vazbu klikněte několikrát abyste obrátili její směr (či formu).

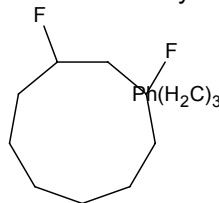
3.2.10 Složitější substituenty

Nástroj **Edit Atom Label**  umožňuje použití složitějších substituentů napsaných ve formě sumárních vzorců.

1. Klikněte na knoflík **Edit Atom Label** na liště atomů a poté na atom fluoru ve vaší trénigové struktuře nejvíce vpravo.
2. V dialogu **Edit Label** napište **(CH₂)₃Ph** a klikněte **Insert**. Všimněte si, že substituent je umístěn tak jak náleží a že číslice označující počet atomů či fragmentů jsou řádně napsány indexem dole (subscript):

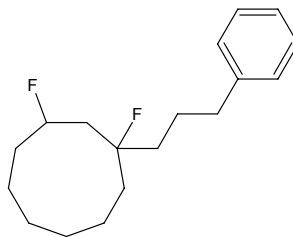


3. Zvolte tlačítko **Change Position**  a klikněte na vytvořený substituent abyste jej překlopili:




Tip Pokud kliknete na substituent nástrojem **Change Position** s tím, že podržíte klávesu SHIFT všimněte si, že se zamění připojovací atomy substituentu.

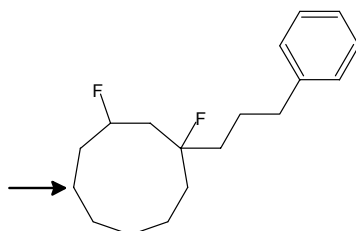
4. Mějte stále zvolen nástroj **Edit Atom Label** a kliknete na náš substituent. Otevře se dialog **Edit Label**. Pak klikněte na knoflík **Expand** a siskáte substituent rozepsaný jako strukturní vzorec:



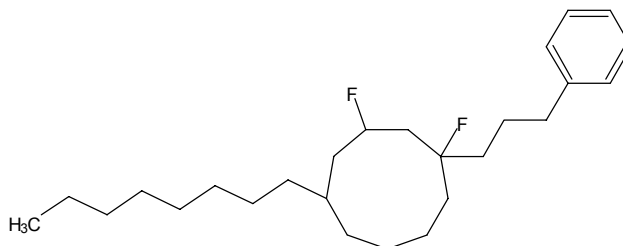
3.2.11 Kreslení řetězců



Použitím nástroje **Draw Chains** můžete snadno kreslit krátké či dlouhé řetězce tak, že je prostě nakreslíte tahem myši.

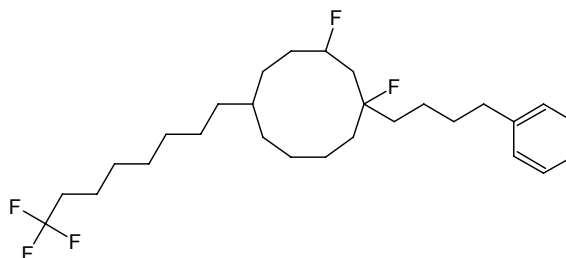
1. Klikněte na knoflík **Draw Chains**  z lišty nástrojů a šipkou ukazovatele myši namiřte na obmyšlený atom:



2. Stiskněte levé tlačítko myši a tahněte doleva. Vytváříte tím alifatický řetěz. Všimněte si, že u ukazovatele myši je zobrazeno pomocné počítadlo uhlíků (C #) v řetězci, které se mění s tím, jak přidáme nebo ubereme článek. Pokračujte až bude řetězec dlouhý 8 uhlíků, pusťte tlačítko a řetězec je nakreslen:

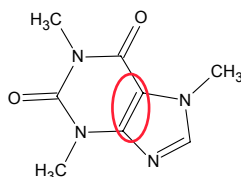


3. Mějte stále aktivní nástroj **Draw Chains** a zvolte tlačítko atomu **Fluoru**  na liště atomů. Klikněte pak na koncový methyl nejvíce vlevo třikrát čímž jej obdaříte třemi fluorovými substituenty. Poté klikněte na **Clean**  na liště struktur a získáte následující strukturu:



3.3 Převracení struktur

Můžete otáčet celými strukturami nebo je převracet jedním kliknutím. Zkuste si prvé tři operace na zakroužkované vazbě molekuly kofeinu:



Poslední dvě operace z tabulky vyzkoušejte tak, že zvolíte (vyberete – funkce je popsána v následující kapitole) celou molekulu.

Knoflík	Funkce	Výsledek
	Zvolte tento nástroj a pak klikněte na označenou vazbu abychom ji orientovali vodorovně. Celá molekula se otočí podle toho.	
	Zvolte tento nástroj a pak klikněte na označenou vazbu abychom ji orientovali svisle. Celá molekula se otočí podle toho.	
	Překlopte molekulu kolem označené vazby.	
	Zvolte celou molekulu (či fragment). Tímto nástrojem překlápíte celou molekulu či fragment (či, pokud není nic vybráno všechny nakreslené struktury) podle vodorovné osy.	
	Zvolte celou molekulu (či fragment). Tímto nástrojem překlápíte celou molekulu či fragment (či, pokud není nic vybráno všechny nakreslené struktury) podle svislé osy.	

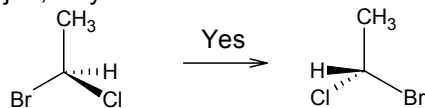
Pozn. Použití nástroje **Flip** může změnit či zachovat stereo-konfiguraci. I tuto funkci lze ovládat. Z nabídky **Options** zvolte **Preferences** a přepněte na záložku **Structure**.

Na spodu panelu je možnost **Keep Stereo Configuration on:**

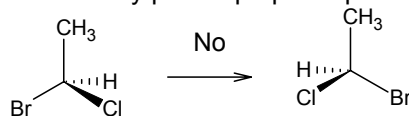
Keep Stereo Configuration on : Clean Flips

Tato funkce ovládá zda program ponechá „pravou“ 3D orientaci molekuly.

Doporučujeme, aby byla zvolena možnost **Flips**. V tomto případě je molekula před operací i po ní stejná, ikdyž se zobrazení změní.:





V případě "No", jsou molekuly před a po překlopení enantiomery:



3.4 Volba, otáčení a prostorové(3D) otáčení




V editoru můžete vybrat atom, atomy, vazby a fragmeny dvěma různými způsoby, používaje nástroje z druhé lišty. Zkuste si jejich funkci na molekulách, které jsme dosud nakreslili.:

- výběrový nástroj laso (Lasso Selector)  či
- výběrový nástroj obdélník (Rectangle Selector) 

Jakmile je fragment(y) zvolen jsou tři cesty jak jimi pohybovat:

- pohybování (Move) ,
- otáčení, změna velikosti (Rotate/Resize) ,
- prostorové otáčení (3D Rotate) ,

anebo na zvoleném fragmentu můžete provést některou z následujících operací:

- vymazat (Delete) ,
- převést do trojrozměrného zobrazení (3D Optimization) . či
- optimalizovat v ploše (2D Optimization (or Clean)) 

3.5 Výstup

Jakmile máte nakreslenou jednu nebo více struktur můžete je zapsat do souboru anebo vytisknout. Můžete je i vložit do jiného dokumentu jako např. MS Word, Excel, atd. Můžete také pro své struktury použít služby internetové laboratoře I-Lab (viz. kapitola 4).

3.5.1 Uchování souboru ChemSketch (SK2)

Uchovemež dokument se strukturami, které jsme nakreslili v předchozí kapitole v předvoleném vlastním formátu ACD,² jako soubor, který nazveme *chapter3.sk2*.

1. From the **File** menu choose **Save**.
2. In the dialog box that appears, specify the name of the file and the directory where the file should be placed. Click **OK**.

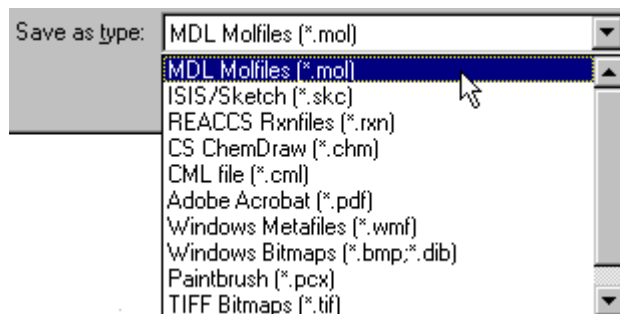
3.5.2 Uchování struktur jako soubor MDL Mol (MDL Molfile)

Jako odpověď na zmatení jazyků (formátů souborů) vzniklé množstvím editorů struktur a programů pro chemické výpočty byl vytvořen společností MDL, Inc. a přijmut většinou softwarových uživatelů a tvůrců standardní formát, který umožňuje převod struktur mezi různými programy. Je to formát „molfile“. Je důležité si uvědomit, že je to formát operující s molekulami a tudíž neuchovává grafy, texty, komentáře a obrázky ale *pouze* struktury molekul.

1. Zvolte strukturu, kterou chcete zaznamenat jako molfile.

² Detaily SK2 formátu jsou k dispozici v dokumenty „SK2 Format“ na URL <http://www.acdlabs.com/download/#misc>. Formát uchovává „živé struktury“ pro další použití v editoru. Liší se tím, například, od naskenovaných obrázků, které lze měnit jen obtížně.

2. Z nabídky **File** zvolte **Export...** Na spodku dialogového okna zvolte možnost **MDL Molfiles (*.mol)**:



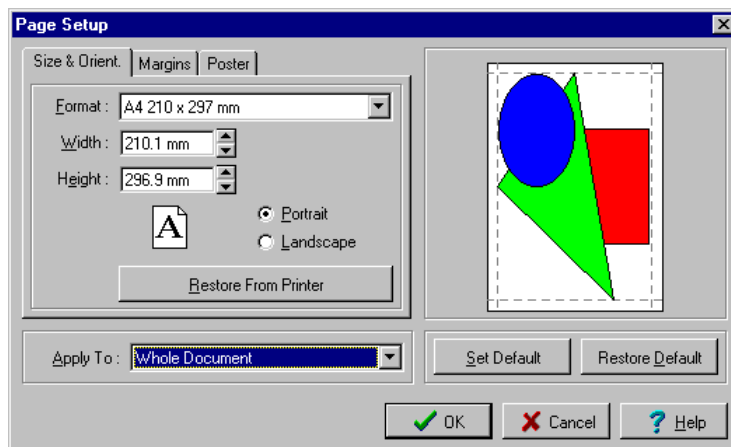
3. Určete název souboru a podadresář pro něj a klikněte **OK**.


Pozn. ACD/ChemSketch verze 5.0 může exportovat do následujících formátů:


ISIS/ Sketch (*.skc),
 REACCS Rxnfiles (*.rxn),
 CS ChemDraw CHM-file (*.chm),
 CML file (*.cml) - **Novinka!**,
 Adobe Acrobat (*.pdf) - **Novinka!**,
 Windows Metafiles (*.wmf),
 Windows Bitmap (*.bmp, *.dib),
 Paintbrush (*.pcx),
 TIFF Bitmaps (*.tif),
 GIF Bitmaps (*.gif),
 MDL MOL-File (*.mol).

3.5.3 Tisk

1. Před zahájením tisku se ubezpečte o nastavení tiskové strany (page setup settings). Z nabídky **File** zvolte **Page Setup...** . Zobrazí se dialog, kde můžete specifikovat velikost papíru, orientaci, okraje (margins) stránky ale i fakt, zda stránku chcete tisknout jako plakát (poster; více detailů o této možnosti v kapitole 8.7):




2. Klikněte **OK** pokud jste spokojeni.
3. Klikněte na knoflík **Full Page** , který zobrazí celou stranu vašeho díla, takže uvidíte jak vypadá.
4. Je-li třeba upravte objekty na stránce.

5. Z nabídky **File** zvolte **Print** anebo klikněte na ikonu . Zobrazí se dialog tisku (**Print dialog**) kde si zvolte počet kopií a klikněte **OK** aby tisk zahájil.

3.5.4 Zakomponování struktur do dokumentu



Někdy potřebujeme vkomponovat do svého dokumentu (v jiné aplikaci než ChemSketch) obrázek struktury (např., dokument Word, tabulka Excel, atd.).

1. Zvolte strukturu/y.
2. K okopírování zvolené struktury do paměti Clipboard, klikněte **Copy** .
 - NEBO-
 - Z nabídky **Edit** zvolte **Copy**.
 - NEBO-
 - Zmáčkněte na klávesnici CTRL+C.
3. Přeneste se do aplikace, kam chcete struktury vkomponovat a použijte funkci Paste (CTRL+V).

Pozn. Pokud přenášíte struktury z ChemSketch do některých aplikací (např., Microsoft Excel), může být struktura převedena na soustavu čísl a znaků (jako MDL molfile). Aby byla struktura representována obrázkem, použijte funkci Paste Special z této aplikace. Pokud se vám nabídnou možnosti vyberte **ACD ChemSketch 2.0 Object** nebo **Picture**. Pokud je obrázek vnesen jako objekt ChemSketch je (není-li tomu zabráněno některou nastavenou volbou programu samotného) s vlastnostmi tzv. OLE objektu. Objekty s vlastností OLE mohou být i z nové aplikace editovány opět v aplikaci ve které byly stvořeny (ChemSketch) pouhým dvojitým kliknutím na tento objekt. Vyzkoušejte si, podmínkou je, aby na počítači byly řádně instalovány všechny potřebné programy a jejich složky.

3.6 Vyčištění pracovní plochy

Abychom vyčistili pracovní plochu okna ChemSketch můžeme:

- ⇒ Otevřít nový dokument, z nabídky **File** zvolením **New**.
- ⇒ Přidat čistou stránku k dokumentu ChemSketch nástrojem **New Page**  z levé horní lišty.
- ⇒ Z nabídky **Edit** zvolit **Select All** a pak z téže nabídky povel **Delete**.
- ⇒ Otevřít nástroj **Delete**  ze základní lišty. Kliknutím do prázdného prostoru na pracovní ploše mimo nakreslené struktury zvolíme všechny a pak je vymažeme.

4. Začínáme s ACD/I-Lab

4.1 V kapitole probereme

Nyni, když jsme se se naučili jak kreslit molekuly pomocí ChemSketch, můžeme zkusit ce s nimi můžeme podniknout!

Tato kapitola poskytne základní informaci jak pracovat s I-Lab (zkratka pro „Interactive Lab“) prostřednictvím portálu ChemSketch jako interface. Neposkytne úplnou informaci o možnostech a funkcích I-Lab ale umožní vám začít s jejich objevováním. Naučíte se:

- co je to ACD/I-Lab a co potřebujete k použití této služby;
- jak nastavit váš počítač v případě že jste připojeni k Internetu přes program typu firewall nebo pomocí proxy;
- jak pracovat s I-Lab jako host (guest);
- co je to „demo key“ a jak jej obdržet;
- jak se registrovat v I-Lab;
- jak aktivovat váš I-Lab účet (account);
- jak se připojit (log in); a
- jak začít počítat vlastnosti molekul.

Použijeme názvoslovnou službu „IUPAC Name Free service“, která je přístupná zdarma jako příklad „výpočtu“.

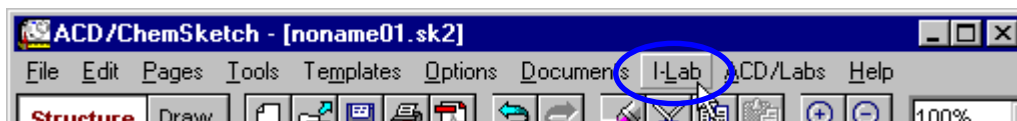
4.2 Obecné body

ACD/I-Lab je Internetová služba, která umožňuje okamžité a přímé připojení k chemickým databázím a programům kalkuluujícím vlastnosti molekul společnosti ACD *via* Internet. I-Lab zahrnuje jak placené (fee-based) a neplacené (free) služby. Registrace a členství v I-Lab jsou zdarma.

K tomu, abyste mohli použít služeb a zdrojů ACD/I-Lab přes ChemSketch, budete muset mít:

- Připojení k Internetu (přístup minimálně k URL <http://www.acdlabs.com> a <http://www2.acdlabs.com>) z PC na kterém je ChemSketch instalován,
- K dispozici e-mailovou adresu,
- Nainstalován program ACD/ChemSketch ver. 4.0 nebo vyšší s instalovanými I-Lab Add-in.

Pokud máte již I-Lab Add-in nainstalovány, objeví se ve vašich lištách a nabídkách v ChemSketch nabídka **I-Lab** na liště nabídek:



a navíc ještě knoflík připojení k I-Lab, tzv. **I-Lab Login** (který se po připojení k I-Lab promění v knoflík I-Lab) nalevo na stavové liště:



Pokud jste zakoupili ACD/ChemSketch 5.0, je nanejvýš pravděpodobné, že I-Lab Add-in bude nainstalován (je nakonfigurován během instalace).

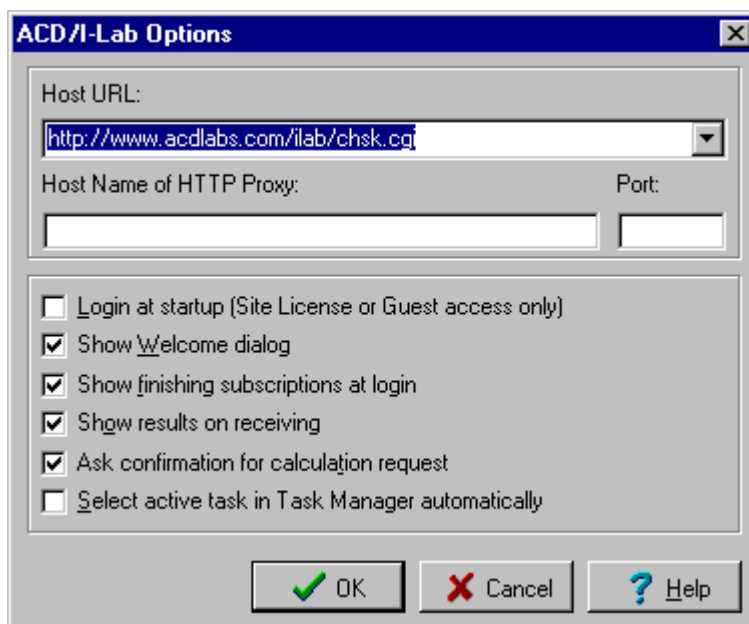
Pokud nevidíte I-Lab menu, např. proto, že máte ChemSketch freeware, anebo, že jste při instalaci tuto možnost vypnuli ručně, můžete si downloadovat zdarma Add-in z URL: http://www.acdlabs.com/download/ilab_addon.html. Důležité je instalovat Add-in do **téhož samého podadresáře** ve kterém je instalován ChemSketch.

4.3 Možnosti připojení

Pokud má váš počítač volný přístup na Internet, přeskočte tuto kapitolku.

Pokud je váš počítač součástí sítě chráněné programem typu *firewall* nebo na *serveru proxy*, pak je nutno nastavit několik funkcí před návštěvou I-Lab.

1. Z nabídky **I-Lab** zvolte **Options...**



2. Vyplňte název proxy (**Host Name of HTTP Proxy**) a případně bránu (**Port**) vaší sítě. Tato informace může být získána od správce sítě.

Pokud dostáváte chybové zprávy typu „Request failed (403) anebo Request failed (407)“, znamená to, že komunikace jde přes váš zabezpečený proxy server. Proxy server vyžaduje uživatelskou autentizaci (user authentication) vložení připojovacího hesla (login/password).

Bohužel, současná verze I-Lab Add-in pro ChemSketch nemá žádnou funkci k tomu aby tuto autentizaci zvládla. V takovém případě můžete požádat správce sítě, aby ve vaší organizaci vyčlenil jeden počítač na práci s I-Lab, nebo můžete pracovat s I-Lab via Web browser. Většina browserů má nezbytné funkce implementovány. Doufáme, že máte jednu z možností náležitě funkční a dále, že tato autentizace bude implementována v příští verzi ChemSketch.

4.4 Přístup jako host

Nejrychlejší cesta jak nahlédnout do služeb I-Lab je s použitím přístupu hosta (Guest Access). V tomto případě se nemusíte ani registrovat. Jako host můžete vidět seznam poskytovaných služeb, ale budete moci použít pouze názvoslovnou IUPAC Name Free service.

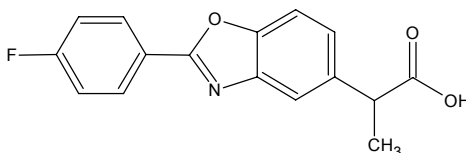
1. Zvolte povel **Login** z nabídky **I-Lab**,
NEBO klikněte na knoflík **I-Lab Login** na stavové liště (viz. nahoře).
2. V dialogovém okně, které se objeví klikněte na knoflík **Guest Login**.
3. Počkejte chvíli (jejíž délka bude záviset na rychlosti vašeho připojení) až se objeví uvítací okno.
4. Klikněte na **OK** a dialogové okno se zavře. (Můžete i kliknout na knoflík **News** a přečíst si poslední novinky od I-Lab).

Nyní máte zobrazeny služby k vaší dispozici (klikněte na knoflík I-Lab na stavové liště nebo zvolte nabídku I-Lab) a použijte službu IUPAC Name Free service.

4.5 Provedení výpočtu

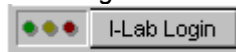
Jakmile jste zalogováni (buď jako registrovaný uživatel nebo jako host), můžete začít s výpočty. V této kapitole ukážeme jak se používají názvoslovné služby zdarma v tzv. IUPAC Name Free. Zprvė, nakreslete strukturu, kterou chcete pojmenovat.

1. Přepněte se v ChemSketch do módu Structure a nástroji, které známe z kapitoly 3, nakreslete svou strukturu, např.



2. Pokud máte na stránce namalováno více struktur zvolte jednu, kterou pojmenujeme.
3. Zkontrolujte log-in. Poznáte to na levém konci stavové lišty. Měla by obsahovat knoflík **I-Lab** a semaforek by měl být v tlumených barvách:

Před Login:

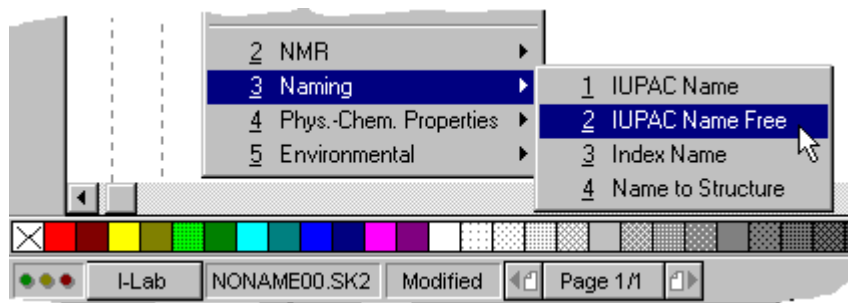


Po Login:

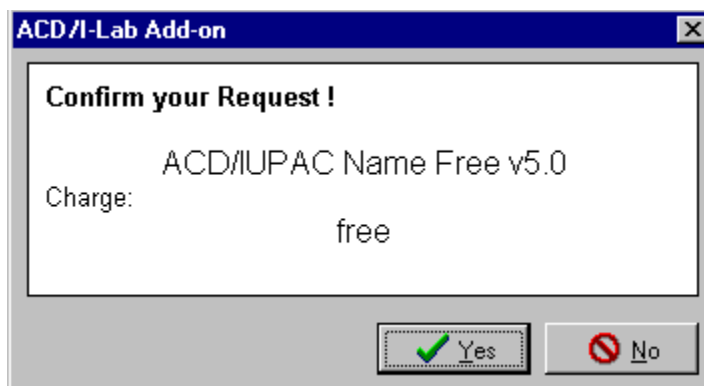


Pozn. Okénko ukazující částku peněz, která je na vašem účtu (zobrazuje se černě) anebo částku, kterou systému dlužíte (žlutě) není zobrazován, pokud jste připojeni pomocí síťové licence nebo jako host.

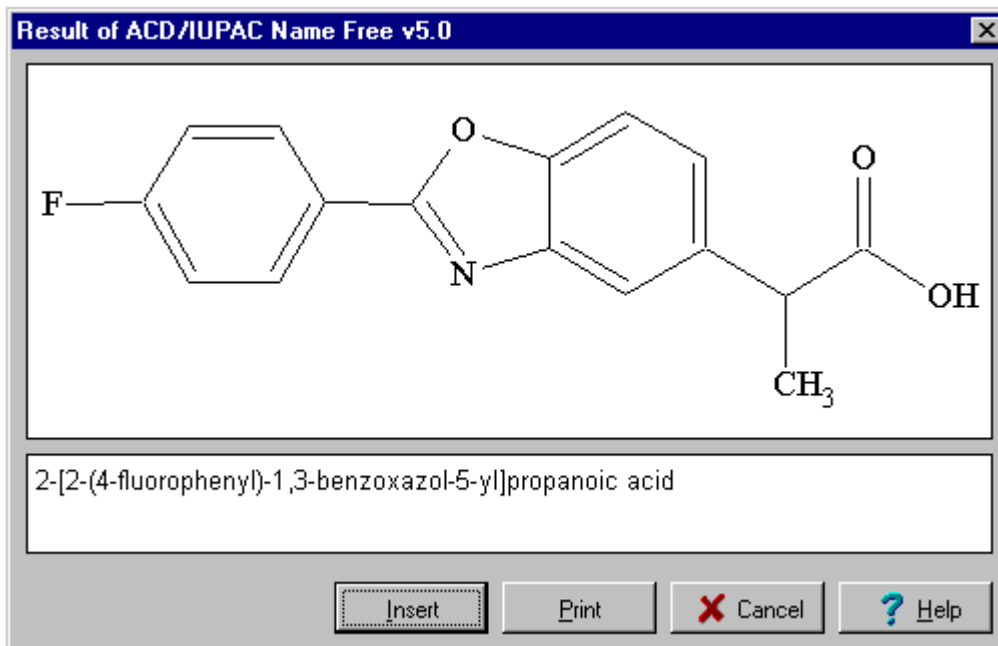
4. Klikněte na knoflík **I-Lab** a zobrazí se nabídkový panel kde naleznete **Naming > IUPAC Name Free**:



5. Objeví se dialogový box, který informuje o některých potřebných skutečnostech. (Tento box nemusí vždy vypadat podle obrázku, přináší však důležité informace.)
6. Klikněte na **OK** a příští dialogový box nás upozorní na službu, kterou jsme vybrali a o její ceně. (Všimněme si, že žádáme službu zdarma „free“ v tomto případě).



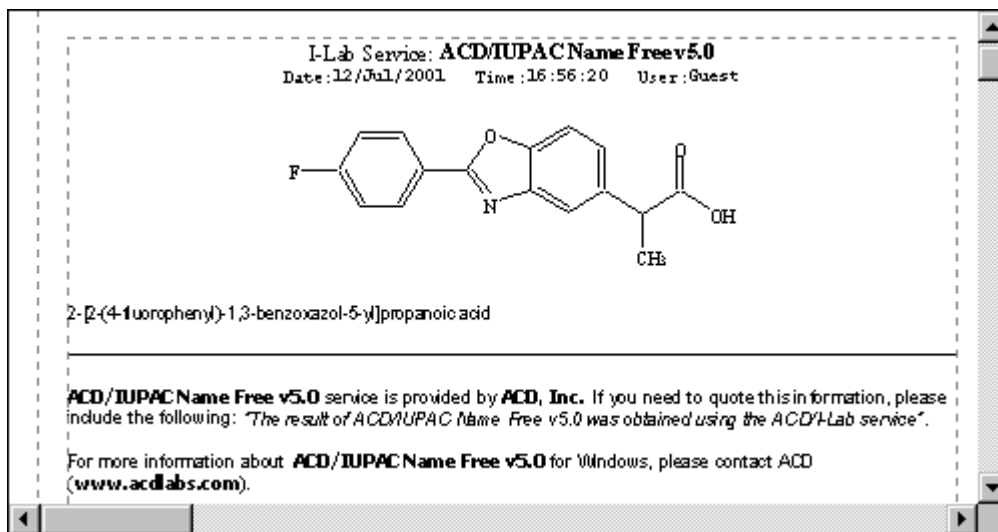
7. Klikněte **Yes**. Jakmile je váš požadavek zpracován objeví se dialogový box s výsledkem:



Pozn. Pokud není zaškrtnut čtvereček **Show results on receiving** v dialogovém okně **ACD/I-Lab Options** (nabídka **I-Lab** menu > **Options...**), nezobrazí se dialogové

okno s výsledkem ale výsledek se přesune do tzv. **Task Manager** (nabídka **I-Lab** menu).

8. Abychom vytvořili o naší práci zprávu (report) zvolte knoflík **Insert**. Nakreslená struktura, její vygenerovaný název a informace o výpočtu I-Lab jsou přesunuty na nový list v okně ChemSketch:



Pozn. K odkazu na použití I-Lab v článku či odborné práci (což lze i u nás považovat za slušnost, pozn. překl.) je na straně s výsledky doporučená fráze. V češtině fráze zní: „Byl použit program ACD/IUPAC Name Free verze 5.0 získaný prostřednictvím služby ACD/I-Lab“.

9. K návratu na předchozí stránku v ChemSketch se strukturami použijte tlačítko se šipkou na stavové liště dole.

4.6 Uživatel na zkušenou

Pokud se vám líbilo to, co jste viděli když jste byli v I-Labu zaregistrováni jako hosté při použití **Guest access / IUPAC Name Free calculation**, zvažte další krok – stát se plně licencovaným uživatelem „na zkušenou“ a obdržet tzv. demo key.

Demo key vám umožní vyzkoušet si služby I-Lab po omezenou dobu. Během této doby (demo period), budete mít přístup ke všem službám I-Lab absolutně zdarma. Po uplynutí této doby budou na váš I-Lab účtovány běžné poplatky za použití na základě ceníku akce po akci.

Demo key je přidělován zpravidla na dva týdny (14 dní). Distributor nebo prodejce musí o váš demo key požádat značnou dobu předem, je výhodnější, pokud se s administrátorem I-Lab-u spojíte sami přímo.

Demo key pro vás musí vygenerovat I-Lab administrátor. Pokud dostane firma požadavek na demo key nejde o automatickou aktivaci účtu, proces je v tomto případě individuální a je vyřizován administrátorem osobně.

Pouze jeden demo key je možno vydat jednomu zákazníkovi. Typicky je demo key vydáván ke každému nově otevřenému účtu I-Lab. Nicméně i takový demo key musí být vyžádán u administrátora, v žádném případě není vydáván automaticky.

Demo key se použije pouze jednou! Pro otevření účtu na zkušenou není nutno používat klíč pokaždé. Použijete jej jednou a pak se jednoduše pokaždé při další seanci zalogujete.

Pokud nastanou problémy při použití účtu I-Lab na zkušenou (demo key) I-Lab administrátor je oprávněn manuálně nastavit délku demo periody účtu zákazníka.

4.6.1 Jak obdržíme Demo Key

1. Ujistěte se, že nejste připojeni k I-Lab. Pokud jste, pak z nabídky **I-Lab** vyberte **Log Out**.
2. Z nabídky **I-Lab** vyberte **Request Demo Key....** Vás standardní poštovní klient bude aktivován a bude obsahovat standardní žádost o otevření demo-účtu. Přečtěte si depeši, doplňte požadované údaje a odešlete ji.

Pozn. Pokud se poštovní klient automaticky sám neotevře, můžete prostě odeslat na adresu ilab@acdlabs.com odeslat jednoduchý e-mail s textem např. „Send me a Demo Key“ a tuto žádost doplňte svým jménem, pracovištěm (místem) a připojte telefonní číslo. Prosíme, abyste si uvědomili, že vyžádání demo key pro I-Lab je obchodní transakce a že souhlasíte s tím, že po uplynutí demo-periody budete za poskytnuté služby I-Lab platit.

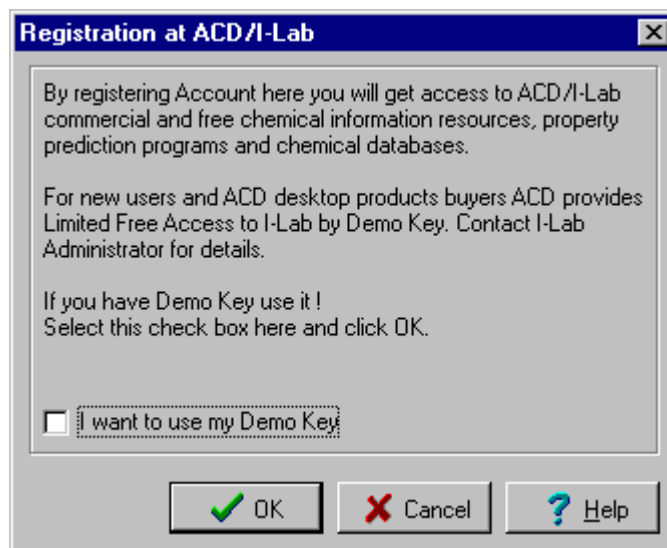
3. Zpráva obsahující přístupový klíč „Demo Access Key“ vám bude zaslána e-mailem během krátké doby, *obvykle během jednoho pracovního dne*. V této zprávě obdržíte také instrukce jak otevřít váš účet v I-Lab.

Pozn. *Nedoporučujeme nikomu, kdo si není dostatečně jist svojí angličtinou pokusit se získat Demo Key, neboť jde o uzavření obchodní smlouvy, která má, samozřejmě, právní závaznost. Neznalost angličtiny může zapříčinit chybné rozhodnutí. Upozorňujeme i na to, že pocit anonymity za klávesnici počítače je naprosto falešný. (překladatel)*

4.7 Registrace

Abyste mohli řádně začít práci s komerčními službami I-Lab a mohli použít váš nový Demo Key musíte se před jeho použitím zaregistrovat a otevřít si vlastní účet.

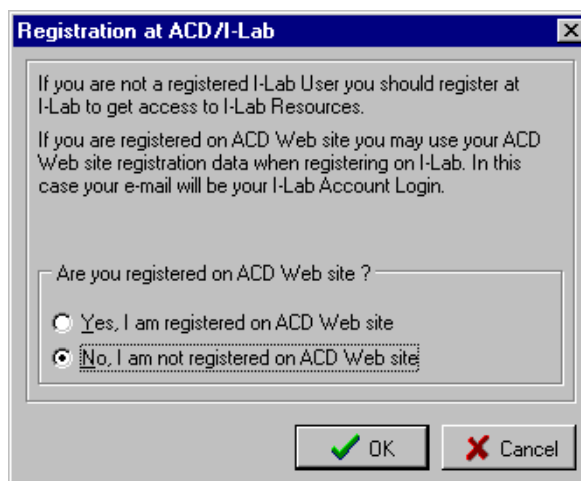
1. Pokud jste zalogováni k I-Lab jako host, pak z nabídky **I-Lab** zvolte **Log Out**.
2. Z nabídky **I-Lab** zvolte **Register at I-Lab**. Objeví se následující box:



3. Pokud nemáte po ruce váš Demo Key (viz. sekce 4.6), vyprázdněte zaškrťovací políčko **want to use my Demo Key** a klikněte **OK**.

Pozn. Pokud chcete použít váš nový Demo Key rovnou, je to možné, zaškrtněte odpovídající políčko. Poté bude však registrační procedura popsaná níže lehce odlišná. Objeví se některé další dialogové boxy a budete několikrát žádáni o zadání kódu Demo Key.

4. Přečtěte si pozorně smlouvu (license agreement), která se objeví a pokud s ní souhlasíte a jste odhodláni ji plnit, zvolte **Agree**.
5. Následující dialogový box se vás dotáže zda jste již registrováni na ACD Web stránkách. Pokud hodláte využívat komerčních služeb, doporučuje zvolit **No...** ikdyž registrováni jste, neboť informace, které jste kdysi poskytli při registraci na Webu mohou být nedostatečné nebo i chybné. Klikněte **OK**.



The dialog box titled "Registration at ACD/I-Lab" contains the following text:

If you are not a registered I-Lab User you should register at I-Lab to get access to I-Lab Resources.

If you are registered on ACD Web site you may use your ACD Web site registration data when registering on I-Lab. In this case your e-mail will be your I-Lab Account Login.

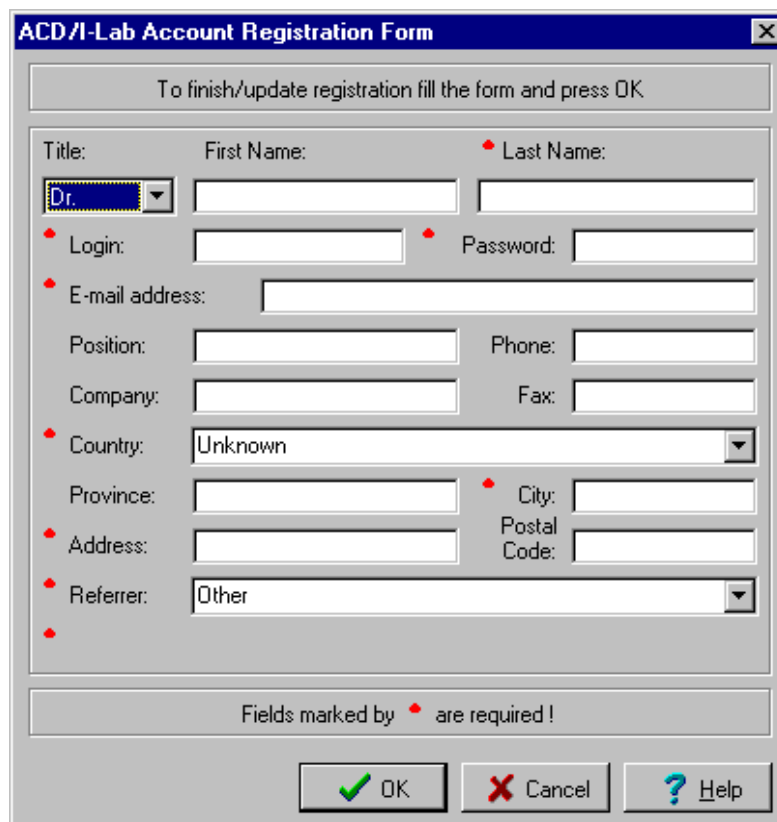
Are you registered on ACD Web site ?

Yes, I am registered on ACD Web site

No, I am not registered on ACD Web site

Buttons: OK (with green checkmark), Cancel (with red X).

6. Objeví se vám formulář „ACD/I-Lab Account Registration Form“, ve kterém vyplníte příslušné údaje. Údaje označené červenou značkou jsou povinné:



The "ACD/I-Lab Account Registration Form" contains the following fields and instructions:

To finish/update registration fill the form and press OK

Title: First Name: Last Name:

Login: Password:

E-mail address:

Position: Phone:

Company: Fax:

Country:

Province: City:

Address: Postal Code:

Referrer:

Fields marked by • are required !

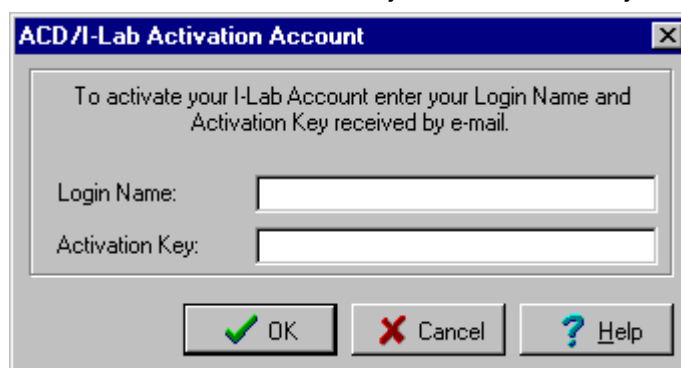
Buttons: OK (with green checkmark), Cancel (with red X), Help (with question mark).

7. Vyplňte vaše osobní údaje a klikněte **OK**, poté budete požádáni k zadání hesla a bude vám ukázána informace, kterou jste vyplnili do dotazníku. Ověřte jejich správnost a je-li vše správně, klikněte **OK**.
8. Bude vám zaslána automatická e-mailová zpráva na e-mailovou adresu, kterou jste vyplnili. Zpráva bude označena jako „Your ACD/I-Lab activation key” a bude obsahovat váš aktivační kód a připomene vám váš login a heslo(password).

4.8 Aktivace vašeho účtu I-Lab

Jakmile jste se registrovali a obdrželi aktivační klíč musíte svůj účet aktivovat.

1. Z nabídky **I-Lab** zvolte **Activate Account...** a objeví se vám následující dialog box:



2. Vepište váš login a aktivační klíč, které jste dostali e-mailem. Klikněte **OK** a aktivace bude zahájena.

Tip Můžete (abyste předešli chybě) zkopírovat (copy / paste) aktivační klíč z e-mailu přímo do dialogu použitím CTRL+C a CTRL+V.
3. Obdržíte informaci, že aktivace byla provedena úspěšně. Váš účet I-Lab je nyní připraven k použití. *Toto je jediný případ, kdy potřebujete použít váš aktivační klíč.*

4.9 Logging In

Jakmile jste úspěšně registrováni, můžete se připojit (log in).

1. Z nabídky **I-Lab** zvolte **Login** a klikněte na knoflík **I-Lab Login** na stavové liště.
2. Budete požádáni o login name a password.

Pozn. Pokud se chcete připojit jako host (guest), jednoduše klikněte na knoflík aniž poskytnete login a password.
3. Klikněte **OK**. Objeví se potvrzení vašeho spojení s I-Lab.

Pozn. Pokud není spojení možné objeví se chybové hlášení (error message). Můžete se zkusit připojit později.
4. Podle instrukcí v sekci 4.5 zkuste znovu použít IUPAC Name Free calculation.
5. Pokud chcete použít jinou funkci I-Lab pak z nabídky **I-Lab** zvolte název služby, kterou chcete použít. Objeví se box žádající potvrzení objednávky „Confirm your request” ve kterém můžete zvolit **No**, pokud se rozhodnete objednávku zrušit.

5. Kreslení složitějších struktur

5.1 V kapitole probereme


Nyní, když jsme se seznámili se základy kreslení struktur v kapitole 3, a a viděli, jak mohou být struktury použity jako vstupní data pro výpočty, v tomto případě webové orientované, v kapitole 4, je namístě seznámit se s kreslením složitějších struktur používající pokročilejší úroveň nástrojů ChemSketch.

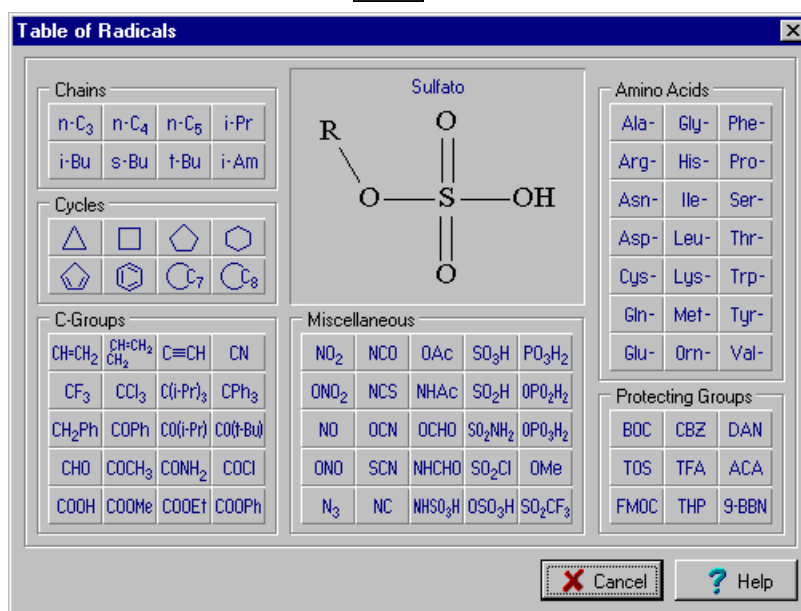
V této kapitole se naučíme jak:



- používat tabulku substituentů pro kreslení různých fragmentů;
- rychle kreslit cyklické struktury;
- odstraňovat a zaměňovat atomy;
- kreslit dvojité a trojné vazby;
- kreslit nabitě atomy, kationty a anionty; a
- měnit různé vlastnosti atomů.

5.2 Použití tabulky substituentů

Tabulka substituentů (Table of Radicals) obsahuje připravené, nakreslené struktury aminokyselin, chránících skupin, nukleotidů a jiných často používaných fragmentů molekul.



1. Vyčistěte si pracovní pole podle pokynů, které jsme se naučili.
2. Klikněte na knoflík **Tabulky substituentů**  na liště **odkazů**. Zobrazí se :

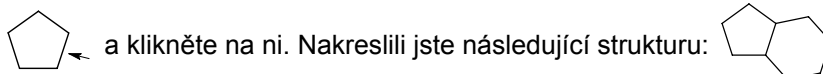


- Klikněte na knoflík **cyklohexanu**  v tabulce.
- Knoflík **cyklohexanu** se nám umístí (a je i aktivován) i na liště odkazů na pravé straně.
- Opakujte to samé s knoflíkem **cyklopentanu** .

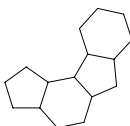
Pozn. Pokud vyberete další fragment z tabulky, umístí se vám jeho tlačítko na liště automaticky. **K odstranění těchto knoflíků** z lišty, dvakrát klikněte na kterýkoliv z nich a potvrďte **Yes**.

5.3 Kreslení cyklických struktur

- Zvolte knoflík cyklopentanu  na liště odkazů NEBO jej zvolte z **Tabulky substituentů**.
- Klikněte na pracovní plochu a nakreslí se vám na ní pětičlenný kruh.
- Na téže liště vyberte knoflík cyklohexanu . Aktivujte šipkou myši naznačenou vazbu

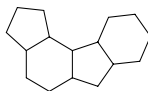


- Opkujte postup a nakreslete:




- Klikněte na tlačítko **Set Bond Vertically**  a poté na naznačenou vazbu  a

otočíte vzorcem tak, že dostanete:

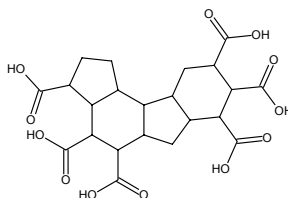


- Klikněte na knoflík **Tabulka**  na liště odkazů.

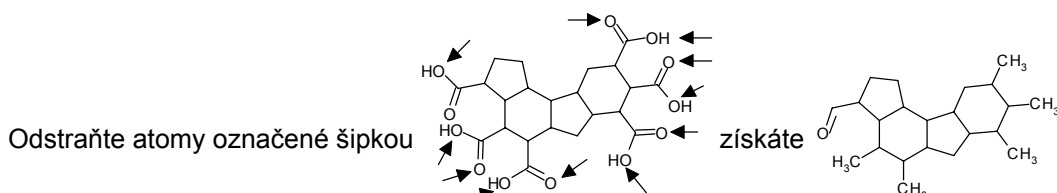
- V **Tabulce**, vyberte karboxyl  kliknutím na jeho knoflík **COOH**.

- Klikněte postupně na naznačené atomy tetracyklu  a do označených

pozic zavedete karboxyl:





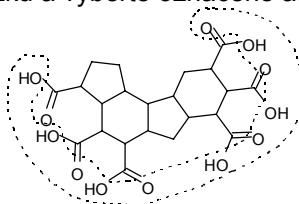
5.4 Odstraňování atomů a fragmentů




Můžete to udělat dvěma způsoby: odstraňte atomy postupně po jednom (viz sekce 3.2.3) anebo je odstraňte najednou.



5.4.1 Odstraňování několika atomů najednou

- Klikněte na knoflík přepínače **lasa**  na liště struktur a aktivujte funkci výběru **lasem** . Všimněte si, že tím zároveň aktivujete nástroj **vyber/pohni** (Select/Move).
- Táhněte lasem jako na obrázku a vyberte označené atomy:

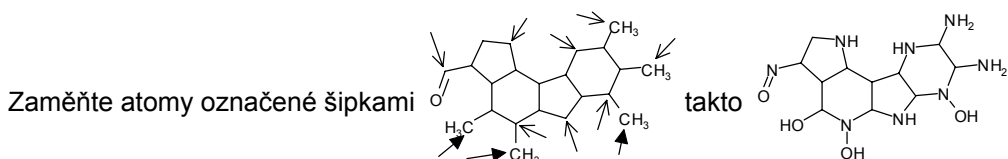




Pozn. Tečkovaná čára na obrázku ukazuje kudy máte lasem táhnout, na vašem obrázku se ale nenakreslí, pouze atomy, které budou do lasa uzavřeny budou vybrány (aktivovány).

- Klikněte na **mazací** knoflík  na základní liště.
- Klikněte na kterýkoliv z vybraných atomů a všechny je vygumujete najednou.

Pozn. Můžete vybrat atomy, vazby a fragmenty dvěma způsoby, **lasem**  anebo **obdélníkem** . Výběr můžeme zrušit tak, že klikneme kamkoliv na prázdné místo na pracovní ploše.




5.5 Záměna atomů

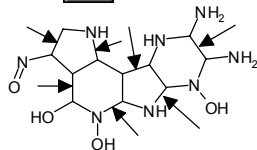


- Klikněte na knoflík **dusíku**  na liště atomů vlevo a pak klikněte na každý z tenkou šipkou označených dusíků.
- Klikněte na knoflík **kyslíku**  na liště atomů a pak klikněte na tři uhlíky označené šipkou s plným hrotem.

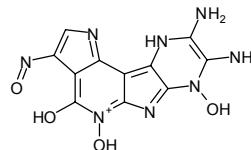
Pozn. Nelze nahrazovat atomy nástrojem **souvislého kreslení** (viz sekce 3.2.6).


5.6 Kreslení dvojných a trojných vazeb

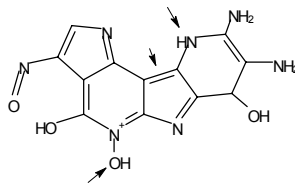
1. Kterýmkoliv nástrojem buď **normálního kreslení** , **souvislého kreslení**  nebo **kreslení řetězců**  klikněte na označené vazby



změníte je tak na dvojně:

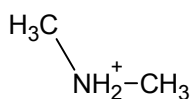


2. Použití nástroje **Změna polohy dvojných vazeb či vodíků**  může být jemně vyladěna struktura tak, jak si ji přejete. Zvolte tento nástroj a klikněte na označené vodíky a vazbu. Všimněte si pohybu vodíků a vazby při opakovaném klikání na totéž místo.:

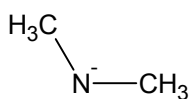


5.7 Kreslení nabitých atomů, aniontů a kationtů

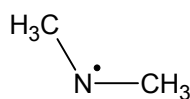
V této kapitole budeme kreslit následující struktury:



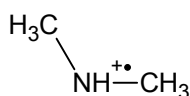
kation



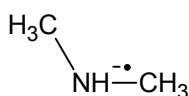
anion



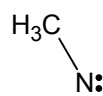
volný radikál



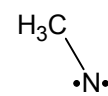
kladný radikál ion





negativní radikál ion

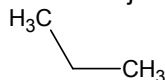



singletový biradikál

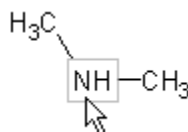



tripletový biradikál






1. Stiskněte knoflík **uhlíku**  na liště atomů a nástroj **normálního kreslení** . Klikněte na jedno místo na pracovní ploše třikrát. Nakreslili jste strukturu:




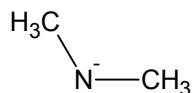
2. Stiskněte knoflík **dusíku**  a klikněte na střední uhlík fragmentu a nahraďte jej dusíkem:




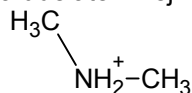
3. Klikněte na spodní trojúhelníkový růžek knoflíku **nábojů (+)**  vlevo na liště atomů a roztáhněte nabídku nástrojů:



	kladný (+) náboj a zvýšení náboje;
	záporný (-) náboj a snížení náboje;
	radikál;
	kladný radikál ion;
	záporný radikál ion.


4. Klikněte na knoflík (-)  a pak na skupinu NH ve vzorci a udělejte z ní anion:

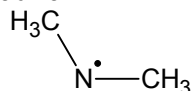



5. Klikněte pravým tlačítkem myši a přepnete nástroj na (+) (anebo zvolte  ze skupiny knoflíků) a klikněte na dusík dvakrát a uděláte z něj kation:

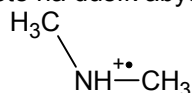



Pozn. Pokud používáte knoflíky **nábojů**,  nebo , ke změně náboje nekovů mění se odpovídajícím způsobem i počet vodíkových atomů tak, aby byla zachována vaznost. Když změňte náboj u kovu mění se náboj podle chemicky smyslného mocenství příslušného kovu. (Běžná mocenství prvků jsou uvedena v **Periodické tabulce**.)

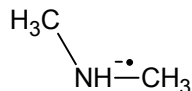
6. Zvolte knoflík **radikálu**  ze skupiny knoflíků ukázaných v kroku 3 výše a klikněte na skupinu NH₂ – znázorníte tak volný radikál:





7. Klikněte na pravé tlačítko myši na volné pracovní ploše a nástroj se změní na **kladný radikál ion** anebo zvolte knoflík  a klikněte na dusík abyste z něj udělali kladný radikál ion:

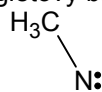


8. Klikněte na **pravé tlačítko myši** na volné pracovní ploše a nástroj se změní na **negativní radikál ion**  a kliknutím na dusík jej změním na negativní radikál ion:

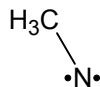


9. Zvolte knoflík **mazání**  nahoře na základní liště a klikněte na pravou skupinu CH₃ a vymažte ji.

10. Ze skupiny knoflíků ukázaných v kroku 3 zvolte **radikál**  a klikněte na skupinu NH několikrát, až získáte následující singletový biradikál:




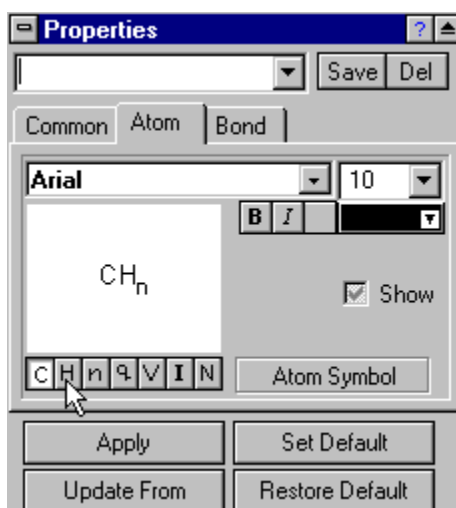
11. Klikněte dál nástrojem **radikál** až nakreslíte tripletový biradikál:



5.8 Změna vlastností atomů

Pokud potřebujete zobrazit vaznost nebo isotopickou hmotu atomu ve struktuře nakreslené ChemSketch — nebo změnit typ písma či velikost jak je atom znázorněn je třeba použít nástroje **vlastnosti (Properties)**.

1. Klikněte na knoflík **vyber/pohybuj** .
2. Dvakrát klikněte na atom jehož vlastnosti si přejete změnit. Otevře se dialog box **vlastnosti**. Zvolíme záložku **Atom**:



3. Volbou tlačítka **C H n q V I N** se zobrazí nastavení, které lze změnit
 - C** – symbol atomu,
 - H** – připojené vodíky,
 - n** – násobitel připojených vodíků,
 - q** – náboj,
 - V** – mocenství,
 - I** – isotopická hmotu,
 - N** – číslování atomů v celé molekule.
4. Jakmile nastavíte ty vlastnosti, které jste chtěli ovlivnit klikněte na **Apply** a změna bude provedena na vybraném atomu.

6. Složité struktury, řetězce SMILES, a reakční schémata


6.1 V kapitole probereme

Tato kapitola je dalším krokem v kreslení složitějších struktur. Probereme dva druhy optimalizace kresby: optimalizace pro účely zjednodušení strukturního vzorce v ploše zobrazení (2D)* a optimalizace v prostorovém pohledu pomocí jednoduchého modelu silového pole (3D). Pokud je toto váš první kontakt s ChemSketch doporučujeme, abyste nejdříve probrali předchozí lekce.

V této kapitole se naučíme jak:

- nakreslit struktury cyklických alkanů a peptidů s použitím 2D optimalizace; nástroj vyčištění (Clean) struktury;
- převést strukturu na řetězec formátu SMILES a *vice versa*;
- použít nástroj **3D Optimalizace** pro nakreslení prostorových projekcí struktur (3D) struktur bicyklo[2.2.2]oktanu, triptycenu, kubanu a dodekahedranu;
- kreslit reakční schémata.

6.2 2D optimalizace

Nástroj Clean  obsahuje proceduru určité 2D-optimalizace nakreslené struktury, tj. překreslení a změnu velikosti tak, aby délky vazeb a vazebné úhly byly pokud možno standardní. Použitím této možnosti je snadnější nakreslit hezky celou řadu struktur. Přečtěte si znovu kapitolu 3.2.8. Pár příkladů nám to ukáže:

6.2.1 Nakreslení struktury cyklických alkanů

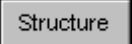



Tato sekce je do jisté míry shodná s filmem **cycloalk.exe**, který si můžete downloadovat z webové stránky ACD, ze složky Movies.

Tato metoda nám pomůže kreslit cyklické alkany snadno a rychle. Nakreslíme si nejprve **cyklononan**:




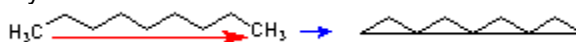
* 2D a 3D znamená two- a three-dimensional, dvou- a trojrozměrný (pozn. překl.)

1. Přepněte ChemSketch do módu struktur  a vymažte vše na pracovní ploše tak, že zadáte CTRL+A a pak DELETE.

2. Zvolte nástroj **kreslení řetězců**  a tažením myši nakreslete řetězec o 9 uhlících. Všimněte si znovu, že indikátor u kursoru vám uhlíky sám spočítá.



3. Klikněte pravým tlačítkem myši a přepněte se do **normálního kreslení**  a spojte tahem myši ona koncové uhlíky vazbou.



4. Klikněte na nástroj **clean**  a získáte následující cyklus:



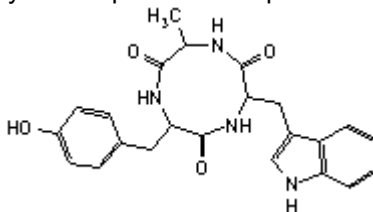
Zkuste si nakreslit kruhy C₁₀ a C₈ za použití této techniky.

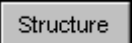
6.2.2 Tvorba struktury cyklického peptidu



Tato sekce je do jisté míry shodná s filmem **pept.exe**, který si můžete downloadovat z webové stránky ACD, ze složky Movies.




Nakresleme si cyklický tripeptid Tyr-Ala-Trp. Znovu se přesvědčíme o užitečnosti knoflíku **clean**.



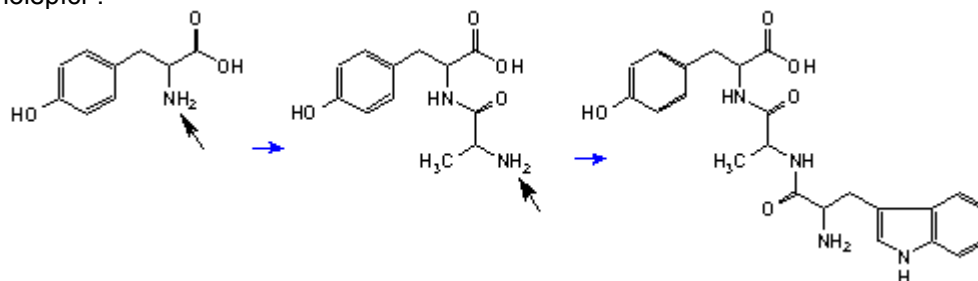
1. Přepněte ChemSketch do módu struktur  a vymažte vše v pracovním poli sekvencí CTRL+A a DELETE.


2. Z okna šablon (**Template Window**)  vyberte záložku **Amino Acids** .


3. Z nabídky aminokyselin klikněte na **tyrosin** a pak klikněte na pracovní plochu. Tyrosin se nám tam okopíruje. (Tyrosin zůstane pro kreslení aktivován (je naznačen „stínem“ až do dalšího povelu, můžeme jej levým tlačítkem myši nakreslit kolikrát chceme, aktivaci zrušíme pravým tlačítkem myši.)

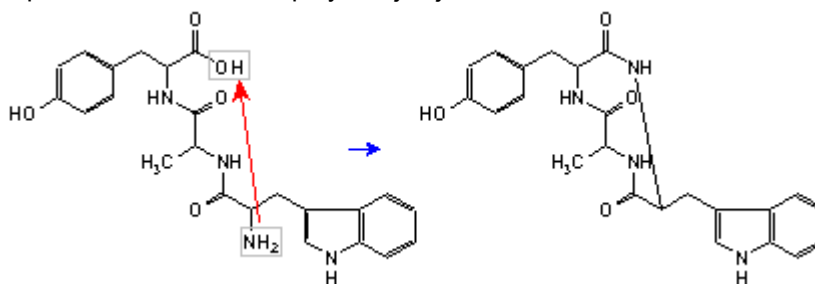
4. Z **tabulky substituentů**  vyberte postupně **alanin**  a **tryptofan**  a připojte je jako substituenty na šipkou označená místa. Všimněte si, že konce substituentů jsou

„samolepící“:

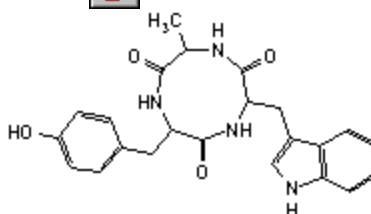


Pozn. Všimněte si, že „stín“ molekuly vybrané z šablony či tabulky substituentů před přepokopáním do pracovní plochy můžete překlopit (i několikrát) tabulátorem TAB. Podobně funguje i nástroj, který tvoří instantní šablony z nakreslených struktur  na liště struktur. Aktivaci (stín) kopírované molekuly zrušíme opět pravým tlačítkem myši.

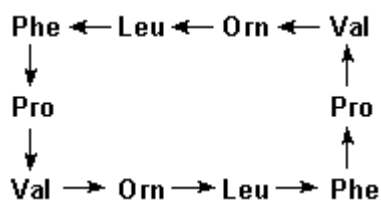
5. Klikněte pravým tlačítkem myši na nástroj **vybrat/přemístit**  a myši „uchopte“ a přetáhněte skupinu NH_2 na místo skupiny OH jak je naznačeno:



6. Pak už jen klikněte na nástroj **clean**  a získáte cyklický peptid:



Zkuste si nakreslit jiné cyklické peptidy, například Gramicidin S:



6.3 Řetězce SMILES - Novinka verze 5.0!

ACD/ChemSketch verze 5.0 může od nynějška převádět zápisové řetězce SMILES (Simplified Molecular Input Line Entry Specification) na struktury a naopak, struktury na řetězce SMILES. Detailnější informace o formátu tohoto zápisu molekulárních struktur (který je jedním z používaných forem počítačové reprezentace struktur tam, kde technika neumožňuje kreslení)

může být naleze na webových stránkách společnosti Daylight Chemical Information Systems, Inc. na následující URL adrese:

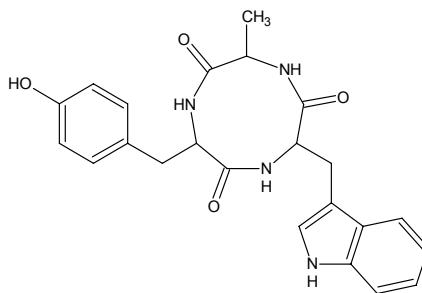
<http://www.daylight.com/dayhtml/smiles/smiles-intro.html>

6.3.1 Generování řetězců SMILES

Nyní vytvoříme řetězec SMILES pro cyklický peptid nakreslený v sekci 6.2.2.

1. Pokud máte na pracovní ploše nakresleno více struktur, zvolte tu, pro kterou chcete generovat řetězec SMILES, v našem případě, řekněme, cyklický peptid.

2. Z nabídky **Tools** zvolte **Generate SMILES Notation**. Generovaný řetězec bude zobrazen přímo pod zvolenou strukturou:



C4(=O)C(Cc1ccc(cc1)O)NC(=O)C(NC(=O)C(Cc2cnc3c2cccc3)N4)C

3. Nyní můžete přepírat textový řetězec SMILES tím, že jej vyberete, použijete povel CTRL+C ke kopírování do Windows clipboardu. Pak můžete zobrazit řetězec v libovolném, např. textovém či tabulkovém editoru pomocí povelu vložit (paste) anebo CTRL+V.

Pozn. Pokud máte na pracovní ploše několik struktur a zvolíte povel **Generate SMILES Notation** aniž byste kteroukoliv vybrali, utvoří se řetězce SMILES pro všechny struktury oddělené tečkou.

6.3.2 Generování struktur z řetězců SMILES

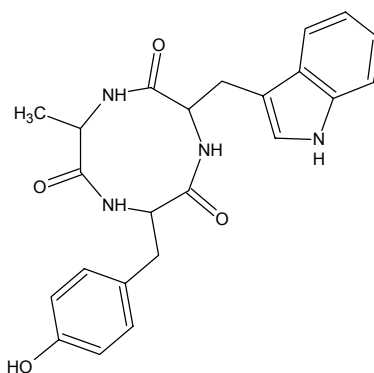
Nyní se vám může hodit i opačný proces (některé databáze, např., poskytují místo struktur SMILES řetězce) — generování struktury z řetězce SMILES. Nejdříve obrátíme postup v předchozím pokusu.

1. Vyberte textový řetězec získaný v předchozím cvičení:

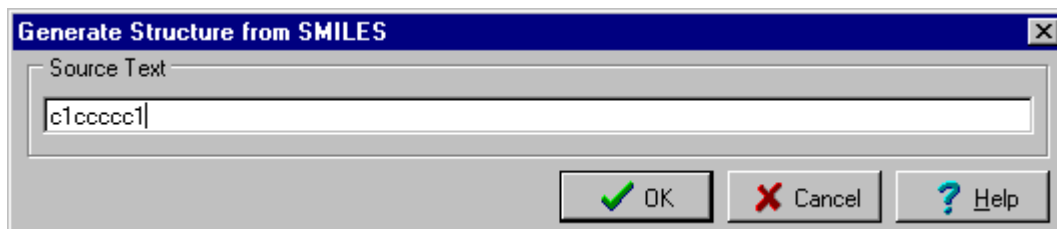
■ C4(=O)C(Cc1ccc(cc1)O)NC(=O)C(NC(=O)C(Cc2cnc3c2cccc3)N4)C ■

2. Z nabídky **Tools** zvolte **Generate Structure from SMILES**. Program vytvoří strukturní vzorec a vloží jej pod textový řetězec SMILES:

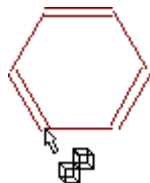
C4(=O)C(Cc1ccc(cc1)O)NC(=O)C(NC(=O)C(Cc2cnc3c2cccc3)N4)C



3. Pokud nemáte příslušný řetězec na pracovní ploše, volba nástroje **Generate Structure from SMILES** zobrazí dialogový box kam napíšete řetězec ručně:



4. Klikněte OK a generovaná struktura se objeví jako stín šablony na kursoru:



5. Klikněte s ním do pracovního prostoru a tím jej tam vložíte.

6.4 3D optimalizace

Tato kapitola ukazuje jak nakreslit projekční prostorové vzorce s relativně realistickými vazebnými úhly a délkami. Je zřejmé, že to často může být obtížné nakreslit takovou strukturu v odpovídajícím měřítku. Nástroje 3D-Optimalizace a 3D-Rotace pomohou uživateli se s tímto úkolem rychle vyrovnat. Mohou poskytnout i jednoduchou představu o prostorovém uspořádání molekul, podobnou jednoduchým molekulárním modelům. Tyto nástroje nám umožní kreslit skutečně složité molekuly relativně snadno pomocí ACD/ChemSketch.

Algoritmus 3D optimalizace je originální program molekulárně mechanického výpočtu se silovým polem, založený na parametrizaci CHARMM³. Modifikace tohoto programu byla provedena hlavně proto, aby se zvýšila jeho stabilita a rychlost. Všimněte si, že 3D-optimizér NENÍ v žádném případě plnohodnotným programem pro molekulárně mechanické výpočty. V této použité verzi je jeho cílem poskytnout s rozumnou reprodukovatelností dostatečně kvalitní konformační 3D projekce z (možná velmi nerozumných) 2D kreseb, spíše než precizní optimalizace 3D struktur.

Pokud 3D-optimizér vytvoří konformace odlišné od vámi očekávaných, je třeba aby vás to nepřekvapilo. Je vlastně kvintesencí konformační analýzy, že molekuly mají typicky mnoho konformací. Optimizér najde jenom jednu z nich a nemusí to být ta očekávaná. Tak například, můžete očekávat, že cyklohexanový fragment bude židlička a optimizér ukáže zkříženou vaničku, která je jednou z vhodných konformací (a vskutku, u řady struktur jsou takové fragmenty ve svých zkřížených formách). V takovém případě můžete zkusit opravit strukturu manuálně a provést 3D-optimalizaci struktury ještě jednou.

Může se stát, že budete chtít provést řádnou konformační analýzu své molekuly za použití specializovaného programu pro molekulární mechaniku anebo kvantově-chemické optimalizační geometrické výpočty. ChemSketch 3D-optimalizovaná struktura vám může posloužit jako vstupní data.

Pozn. Struktury mohou být takto modelovány pokud obsahují atomy C(IV), H(I), F(I), Cl(I), Br(I), I(I), N(III, IV), O(II), S(II, IV, VI) se standardní vazností. Struktury s nabitými

³ B. R. Brooks, R. E. Bruccoleri, B. D. Olafson, D. J. States, S. Swaminathan, and M. Karplus. CHARMM: A program for macromolecular energy, minimization, and dynamics calculations. *J. Comput. Chem.* 4 187-217 (1983).

atomy (s výjimkou azidu a nitroskupiny) nemohou být optimalizovány.

6.4.1 Kreslení bicyklo[2.2.2]oktanu

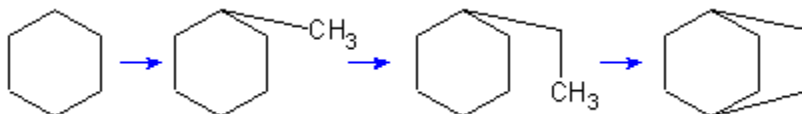


Tato sekce je do jisté míry shodná s filmem **bicyc.exe**, který si můžete downloadovat z webové stránky ACD, ze složky Movies.



Přepněte ChemSketch do **Structure** módu a vyčistěte pracovní plochu, nebo otevřete čistou stranu.

1. Z nabídky **Options** zvolte **Preferences** a zvolte záložku **Structure**.
2. Vymažte pole **Add Hydrogens** a klikněte **OK**.
3. Z **tabulky substituentů** zvolte **cyklohexan** . Klikněte do pracovního prostoru a vložte tam cyklohexan.
4. Klikněte na nástroj **normálního kreslení** a nakreslete uhlovodíkové přemostění (vazby tahnete při kreslení myší na požadovanou délku) podle schématu:



5. Klikněte na nástroj **3D optimalizace** a získáte 3D model ze své struktury.

Pozn. Pokud máte na pracovní ploše více než jednu strukturu můžete tu k 3D-optimalizaci vybrat jedním z nástrojů: **vybrat/pohybovat** .

vybrat/pohybovat/měnit velikost anebo **3D rotace** .

6. Pokud je zaškrtnuta možnost **Switch to 3D Rotation mode** v záložce **Structure** z dialogového boxu **Preferences** (nabídka **Options**), budete optimalizaci automaticky zvolen nástroj **3D rotace**. Pokud tomu tak není, můžete zvolit nástroj **3D-Rotace** . Umístěte kurzor nad libovolnou vazbu či atom a táhněte myší. Struktura se bude „otáčet v prostoru“. Natočte ji takto:

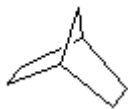


Pozn. Z nabídky **Options** zvolte **Preferences** a vyberte záložku **Structure**. Zde můžete zvolit, zda „zadní“ vazba bude přerušena či ne volnou **Enable** v nástroji pro křížení vazeb **Bonds Intersections**.

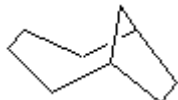
Můžete měnit pozici křížících se vazeb nástrojem **Bring Bond to Front** (CTRL+F) či **Send Bond to Back** (CTRL+K) (z nabídky **Tools**) aplikovaným na zvolenou vazbu. Můžete také přesunout zadní vazbu dopředu nástrojem změny polohy

Change Position pokud zároveň držíte klávesu SHIFT. Všimněte si, že se při stisknutí klávesy SHIFT smění značka u cursoru.

! Zkuste si nyní nakreslit následující struktury sami.



bicyklo[2.2.1]heptan

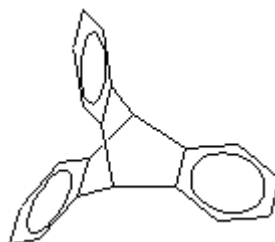


bicyklo[4.2.1]nonan

6.4.2 Kreslení struktury triptycenu



Tato sekce je do jisté míry shodná s filmem **triptyc.exe**, který si můžete downloadovat z webové stránky ACD, ze složky Movies.



Přepněte se do módu **Structure** a vyčistěte pracovní plochu či otevřete novou stránku.

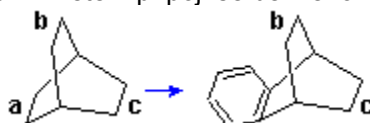
1. Nakreslíme si **bicyklo[2.2.2]oktan** jak popsáno výše

NEBO klikněte na **Template Window**  na liště struktur, poté na záložku **Bicyclics**

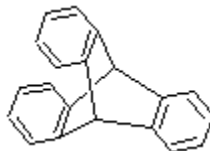
Bicyclics a tam zvolte příslušnou strukturu.




2. Z **tabulky substituentů**  zvolte **benzen** .

3. Umístěte kurzor nad vazbu **a** a klikněte – připojí se benzenové jádro:

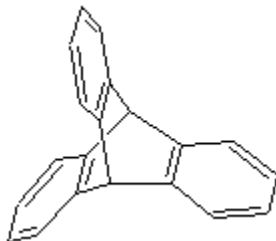


4. Opakujte kroky 2--3 pro vazby **b** a **c** a získáte:




5. Pokud máte na pracovní ploše více než jednu strukturu vyberte tu svou nástrojem ,  nebo .

6. Klikněte na nástroj **3D optimalizace**  a získáte 3D-model:




7. Pokud je zaškrtnut check box **3D Rotation mode** v nabídce **Structure** z dialog boxu **Preferences** (nabídka **Options**) přepne se program automaticky do módu 3D rotace jakmile

je 3D optimalizace hotova. Pokud ne, použijte . Umístěte kurzor nad atom či vazbu struktury a tahem myši jí „otáčejte v prostoru“.

8. Z nabídky **Tools** zvolte **Show Aromaticity** aby se ukázaly kruhy s delokalizovanými vazbami:




6.4.3 Creating the Structure of Cubane

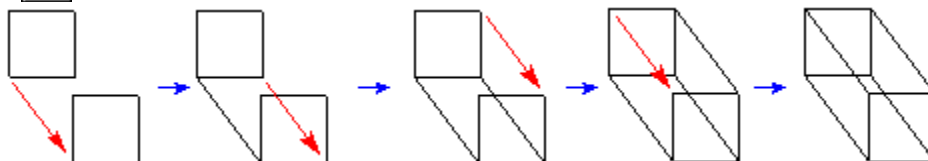
 Tato sekce je do jisté míry shodná s filmem **Pr_cub.exe**, který si můžete downloadovat z webové stránky ACD, ze složky Movies.





Přepněte se do módu **Structure** a vyčistěte pracovní plochu či otevřete novou stránku.

1. Z **tabulky substituentů**  vyberte **cyklobutan** . Vložte jej dvakrát na pracovní plochu.

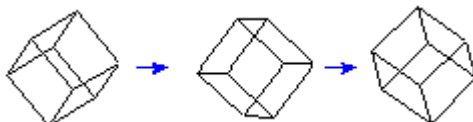
2. Zvolte  a spojte rohy cyklobutanů vazbami tahem myši do podoby hranolu:



3. Klikněte na  a získáte 3D model kubanu.


4. Zvolte , pokud již není zvolen.

5. Umístěte kurzor nad atom či vazbu struktury a tahem myši jí „otáčejte v prostoru“:



Pozn. Z nabídky **Options** zvolte **Preferences** a vyberte záložku **Structure**. Zde můžete zvolit, zda „zadní“ vazba bude přerušena či ne volnou **Enable** v nástroji pro křížení vazeb **Bonds Intersections**.

Můžete měnit pozici křížících se vazeb nástrojem **Bring Bond to Front** (CTRL+F) či **Send Bond to Back** (CTRL+K) (z nabídky **Tools**) aplikovaným na zvolenou vazbu. Můžete také přesunout zadní vazbu dopředu nástrojem změny polohy

Change Position  pokud zároveň držíte klávesu SHIFT. Všimněte si, že se při stisknutí klávesy SHIFT smění značka u kursoru.



Nakreslete si sami následující struktury:



prizman

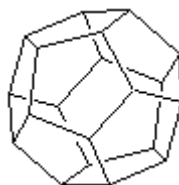


hexacyklo[4.2.0.0^{2,5}.0^{3,9}.0^{4,8}.0^{7,10}]dekan



6.4.4 Kreslíme strukturu dodekahedranu ([5]fullerenu-C₂₀)

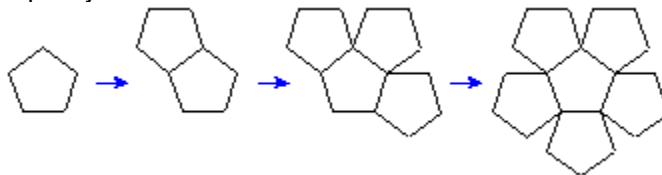


Tato sekce je do jisté míry shodná s filmem **fuller.exe**, který si můžete downloadovat z webové stránky ACD, ze složky Movies.



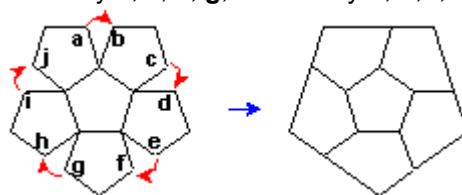
Přepněte se do módu  a vyčistěte pracovní plochu či otevřete novou stránku.


1. Z **tabulky substituentů**  zvolte **cyklopentan** . Vložte jej na pracovní plochu.
2. Postupně myší přidejte kruh na každou z vazeb:

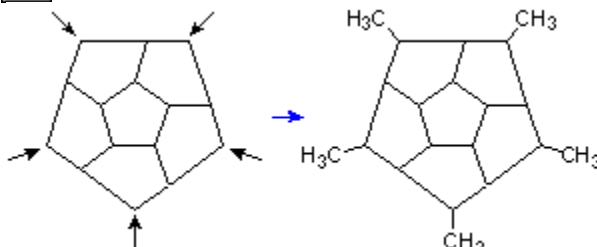


3. Klikněte na pravé tlačítko myši a zvolte nástroj .

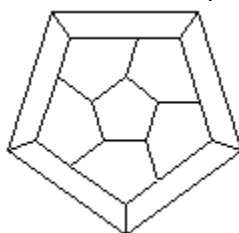
4. Tahem myši přemístíte atomy **a, c, e, g, i** na atomy **b, d, f, h, j** podle obrázku:



5. Zvolte **uhlík**  na liště atomů a klikněte na atomy označené šipkou:

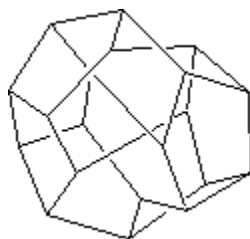





6. Tahem myši spojte jednoduchou vazbou všech pět methylů:




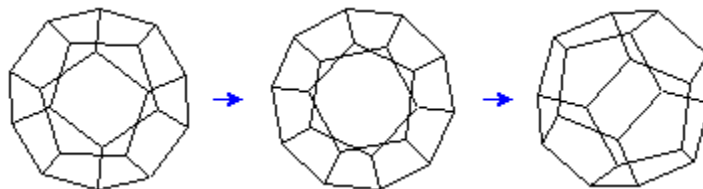
7. Klikněte na  a získáte 3D model.

Pozn. Pokud optimalizace vytvoří „Moebiovskou“ strukturu namísto fullerenu




pak optimalizace zkonvergovala neobvyklým způsobem. Použijte klávesu Undo  a vraťte se zpět. Poté použijte klávesu Clean , případně můžete pomocí nástroje  pohnout s některým atomem a provést optimalizaci znova.

6. Zvolte , pokud již není zvolen. Umístěte kurzor nad atom či vazbu struktury a tahem myši jí „otáčejte v prostoru“:



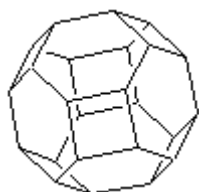
Pozn. Z nabídky **Options** zvolte **Preferences** a vyberte záložku **Structure**. Zde můžete zvolit, zda „zadní“ vazba bude přerušena či ne volnou **Enable** v nástroji pro křížení

vazeb **Bonds Intersections**.

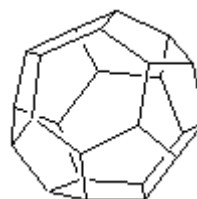
Můžete měnit pozici křížících se vazeb nástrojem **Bring Bond to Front** (CTRL+F) či **Send Bond to Back** (CTRL+K) (z nabídky **Tools**) aplikovaným na zvolenou vazbu. Můžete také přesunout zadní vazbu dopředu nástrojem změny polohy **Change Position** , pokud zároveň držíte klávesu SHIFT. Všimněte si, že se při stisknutí klávesy SHIFT smění značka u kursoru.



Zkuste si nakreslit sami:



[4,6]Fulleren-C₂₄

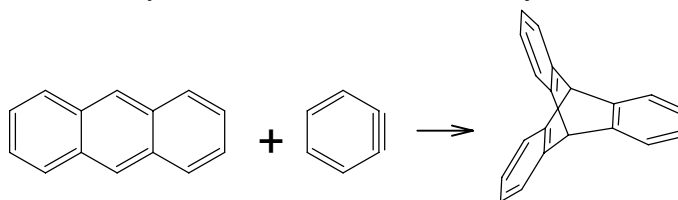


[5,6]Fulleren-C₂₄



6.5 Kreslení reakčního schématu

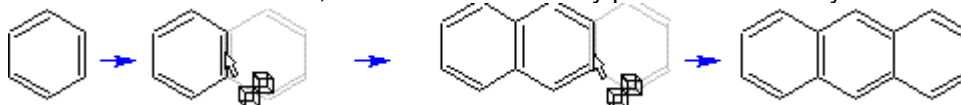


Tato sekce je do jisté míry shodná s filmem **reaction.exe**, který si můžete downloadovat z webové stránky ACD, ze složky Movies. V této sekci si namalujeme reakční schéma:



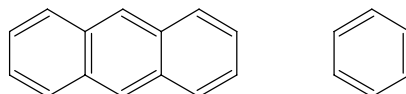
Přepněte se do módu **Structure** a vyčistěte pracovní plochu či otevřete novou stránku.

1. Z **tabulky substituentů**  zvolte **benzen** . Vložte jej na pracovní plochu.
2. Stiskněte klávesu TAB tak, že se vám stín šablony převrátí. Několikerým kliknutím nakreslete:

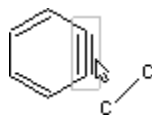


Pozn. Abychom nakreslili spojené kruhy umístíme kursor nad vazbu a klikneme šablonou.

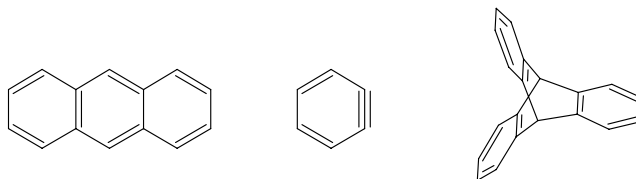
3. Stiskněte TAB aby se stín šablony opět překlopil a vložte ji jako samostatnou strukturu. Klikněte na pravé tlačítko a stín šablony zmizí.



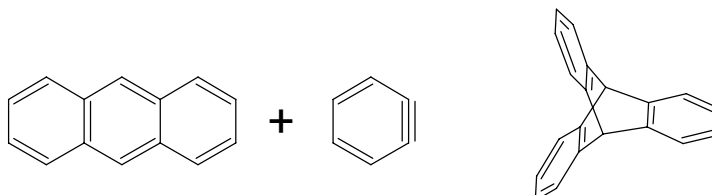
4. Zvolte nástroj **normálního kreslení** na horní liště struktur a klikněte na vazbu, aby se přeměnila na trojnou:



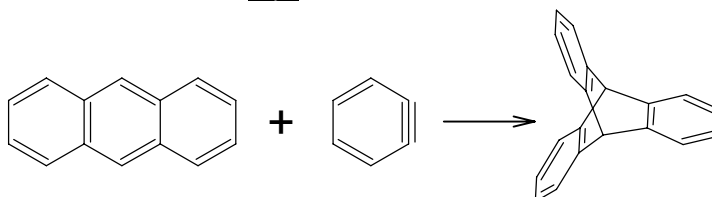
5. Nakreslete triptycen jak je popsáno v sekci 6.3.2 a umístěte jej vedle nakreslených struktur:





6. Z lišty struktur zvolte nástroj **Plus**  a klikněte mezi první dva aromáty:



7. Klikněte na nástroj **reakční šipka**  a klikněte nebo nakreslete tahem myši:



Pozn. Kliknutím na trojúhelníček dole na knoflíku  můžeme volit mezi řadou šipek. Některé se však chovají jako grafické objekty a nemusí být řádně exportovány.

8. K upravení polohy znaménka plus v rovnici zvolte nástroj výběru a pozice , klikněte na objekt a přetáhněte jej myší.

7. Pokročilé kreslení, použití šablon





7.1 V kapitole probereme

Tato kapitolka vás přivede ještě blíže dokonalému zvládnutí kreslení chemických struktur. Seznámíte se v ní s použitím tzv. šablon (template). Naučíte se:

- některé užitečné způsoby použití šablon (template);
- použití nástroje okamžité šablony (**Instant Template**) pro kreslení struktur s opakujícím se motivem;
- další možnosti využití tabulky substituentů (**Table of Radicals**);
- jak používat okno šablon (**Template Window**) pro kreslení molekul DNA a komplexních biomolekul;
- jak tvořit vlastní šablony; a
- jaké šablony jsou např. k dispozici na webových stránkách ACD.

7.2 Přehled

ACD/ChemSketch obsahuje následující nástroje pracující s šablonami:

- Tabulka substituentů ;
- okamžitá šablona ;
- okno šablon ; a
- do jisté míry lze jako zásobárnu šablon použít i ACD/encyklopedii  .

Zatímco spojovací bod (samolepící) kterékoliv šablony z **tabulky substituentů** je předem dán (neměnný), nástroje **okno šablon** a **okamžitá šablona** umožňují zvolit jakýkoliv atom či vazbu tak, že se stane spojovacím centrem jednoduše tak, že na ní klikneme. Ncméně nezáleží na to, odkud daná šablona je, principy jejich spojování jsou stejné. Je několik způsobů jak připojit šablonu k nakreslené struktuře:

- ⇒ Spojením vazeb nakreslené struktury a šablony: umístěte kurzor nad vazby stínem šablony tak, že se dvě vazby překrývají a klikněte.
- ⇒ Připojením šablony k nakreslené struktuře: umístěte kurzor nad odpovídající atom tak, že body ve kterých se má struktura a bod(y) stínu šablony spojit jsou nad sebou a klikněte.
- ⇒ Vytvořením „spiro“ spojení mezi šablonou a strukturou: umístěte kurzor nad atom jenž má být spiroatomem a klikněte zatímco držíte klávesu SHIFT stisknutou. Pokud držíme dvě struktury nad sebou a tiskneme a povolujeme SHIFT je utvořeno buď spiro spojení nebo spojení dvou center vazbou. Zkuste si na dvou fragmentech cyklohexanu.

Pozn. Stín šablony můžete podle potřeby překlápat klávesou tabulátoru TAB.

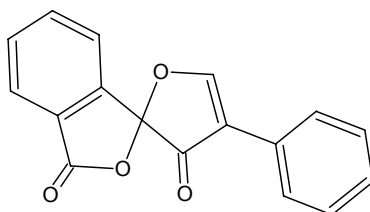
7.3 Tabulka substituentů

Tabulka substituentů (Table of Radicals) je soubor chemických fragmentů pro kreslení struktur. Jejich jména a v některých případech i zkratky jsou uvedeny tak, že snadno můžeme převést chemický „těsnopis“ na smysluplnou strukturu.



7.3.1 Kreslíme strukturu fluoreškaminu

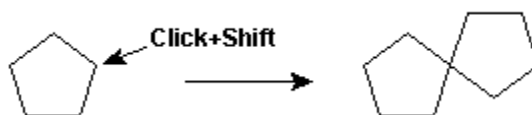


Tato sekce je do jisté míry shodná s filmem **fluor.exe**, který si můžete downloadovat z webové stránky ACD, ze složky Movies. V této sekci si namalujeme:

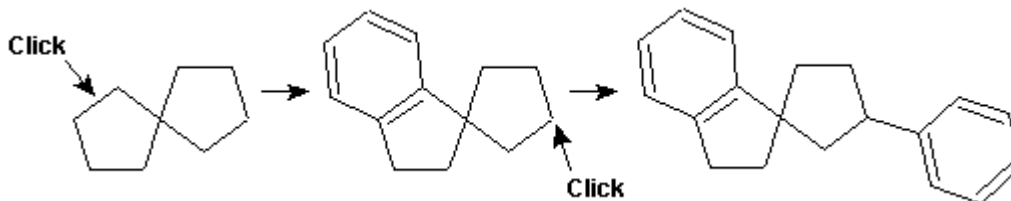




Přepněte se do módu  a vyčistěte pracovní plochu či otevřete novou stránku.

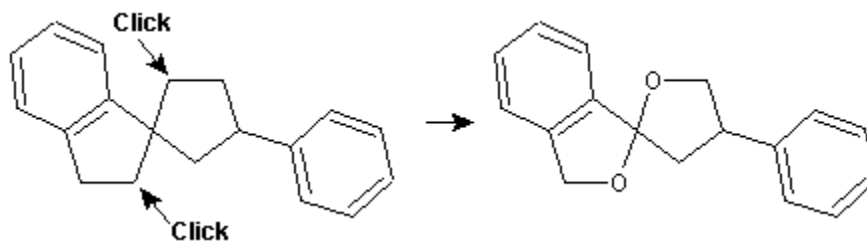
1. Z **tabulky substituentů**  zvolte **cyklopentan** .
2. Vložte jej na pracovní plochu.
3. Klikněte (Click) do označené polohy a držte stisknutou klávesu SHIFT získáte dva spiro-spojené cyklopentany:




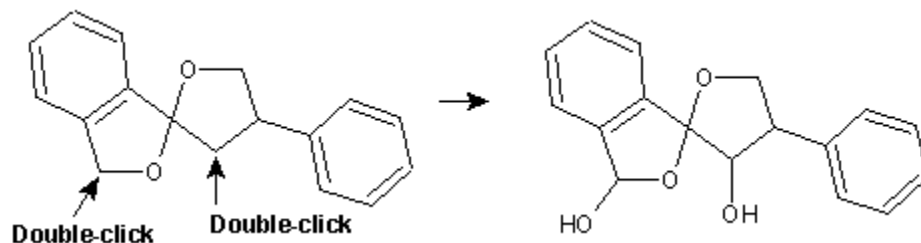
4. Z **Tabulky substituentů**  zvolte **benzen** . Nejprve klikněte na označenou vazbu a připojte benzenový kruh a potom klikněte na označený atom a připojte fenyl:



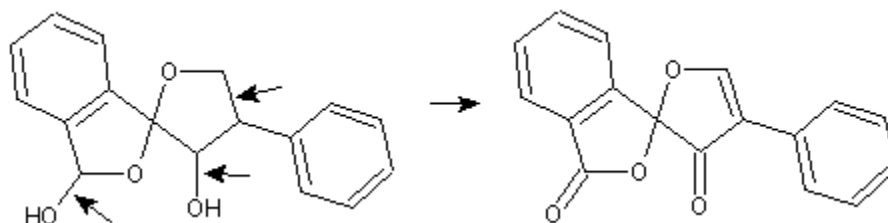
5. Stiskněte knoflík **kyslík**  na liště atomů (všimněte si, že nástroj **normálního kreslení**  se sám aktivuje). Klikněte na označené atomy a nahraďte uhlíky kyslíky:




6. Klikněte na pravé tlačítko myši a přepnete nástroj na **kreslení tažením myši** . Dvakrát klikněte (double-click) na označené atomy a připojte tak na daná místa skupinu OH:



7. Klikněte na označené vazby a změňte je tak na dvojně:



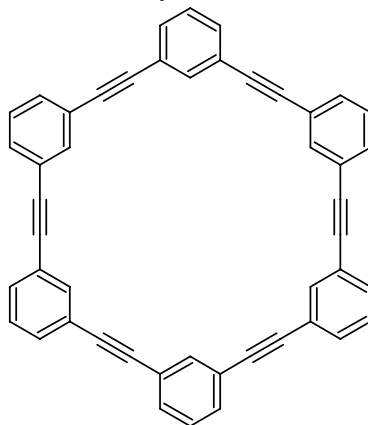
7.4 Nástroj okamžité šablony

Může se naskytnout situace, kdy budete potřebovat vkládat fragment, který není v Tabulce substituentů. Zde se hodí **nástroj okamžité šablony**  jako nástroj pro vkládání. Je lepší než sám povel kopíruj a vlož, neb zde můžeme určit bod spojování.

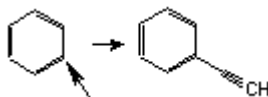
7.4.1 Tvorba struktury cyklického oligomeru



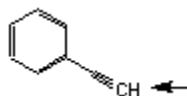
Tato sekce je do jisté míry shodná s filmem **oligomer.exe**, který si můžete downloadovat z webové stránky ACD, ze složky Movies. V této sekci si namalujeme:



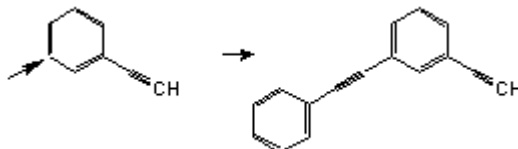
1. Přepněte se do módu **Structure** a vyčistěte pracovní plochu (CTRL+A, DELETE) či otevřete novou stránku.
2. Z **tabulky substituentů** zvolte **benzen**. Posuňte kurzor do horní části pracovní plochy na střed a kliknutím tam benzen umístěte.
3. Z **tabulky substituentů** zvolte **ethynyl** a klikněte na atom označený šipkou a připojte jej ke kruhu:




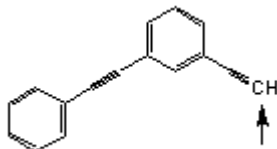
4. Aktivujte nástroj **okamžité šablony (Instant Template)** a klikněte na označený atom. Stvoříte okamžitou šablonu



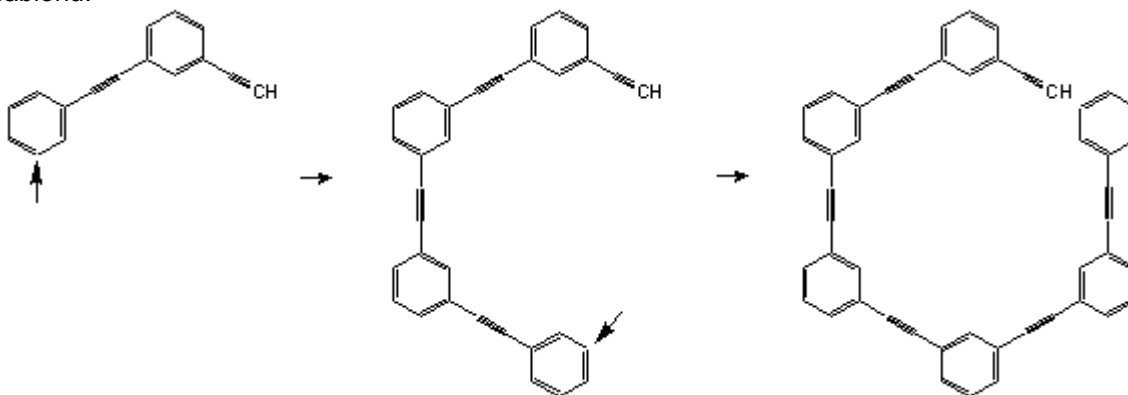
5. Klikněte na atom označený šipkou a připojte šablonu:



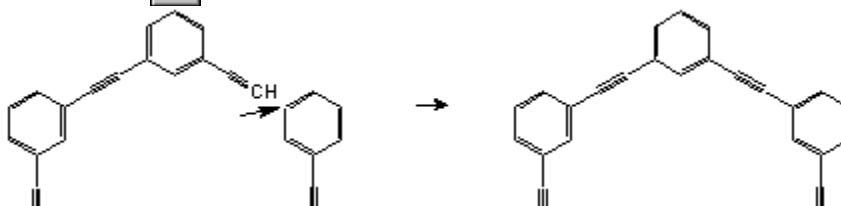
6. Klikněte na  znova a klikněte na atom označený šipkou a šablonou se stane celý fragment:



7. Klikněte na atomy a připojte šablony jako na obrázku. Pravým tlačítkem myši pak zrušte šablonu:



8. Zvolte **normální kreslení**  a klikněte na označený atom a uzavřete kruh:



7.5 Okno šablon

Okno šablon (Template Window) je nejsložitější nástroj ze všech operací se šablonami v programu ChemSketch protože umožňuje předorganizovat a uschovat struktury či kresby, které můžete chtít kopírovat později.

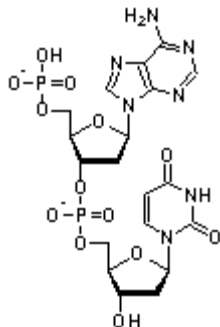


Krátká exkurze do použití ChemSketch šablon (templátů) je k dispozici jako film **templ_st.exe** downloadovatelný z webové stránky ACD ze složky Movies.

7.5.1 Nakreslení fragmentu molekuly DNA




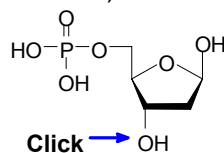
Tato sekce je do jisté míry shodná s filmem **dna_st.exe**, který si můžete downloadovat z webové stránky ACD, ze složky Movies. V této sekci si namalujeme:



Přepněte se do módu a vyčistěte pracovní plochu (CTRL+A, DELETE) či otevřete novou stránku.

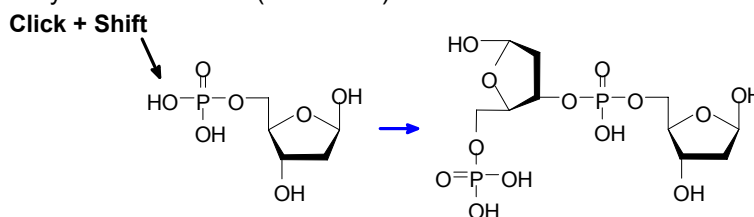
7.5.1.1 Kreslení řetězce deoxyribose-5-fosfátových fragmentů



1. Otevřete okno šablon . Ze záložky **DNA/RNA Kit** vyberte **2-Deoxyribose-5-phosphate** (chain form) kliknutím (click) na označený atom:

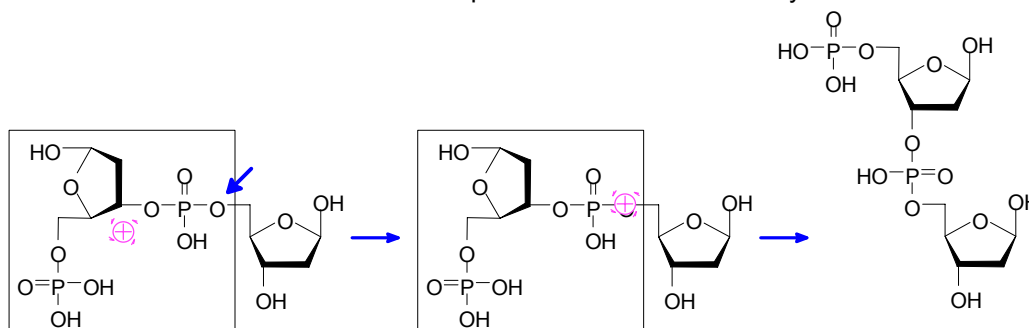


2-Deoxyribose-5-phosphate


2. Klikněte na pracovní plochu a vložte tam zvolenou šablonu.
 3. Umístěte kurzor myši nad označený atom a držíc stisknutou klávesu SHIFT připojte další fragment 2-deoxyribose-5-fosfátu (click+shift):

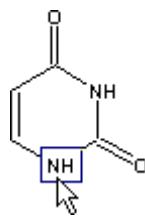


4. Zvolte nástroj otáčení **Select/Rotate/Resize** .
5. Nejprve zvolte označenou část struktury přetažením volícího „obdélníku“ kolem ní (jako na obrázku). Přetahněte střed otáčení  na atom kyslíku označený šipkou. Poté držíc stisknutou klávesu SHIFT otočte celou proznačenou částí kolem kyslíku o 90°:

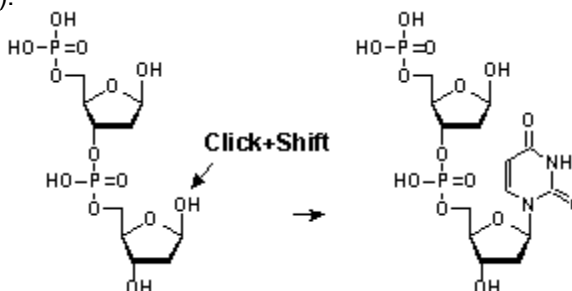


7.5.1.2 Přidání bází

1. Otevřete okno šablon (Template Window) . Ze záložky **DNA/RNA Kit** zvolte nukleobázi kliknutím na atom jímž budete fragment připojovat. Například, pokud vybereme uracil a kliknutím na atom dusíku jej učiníme v tomto místě „lepivým“:

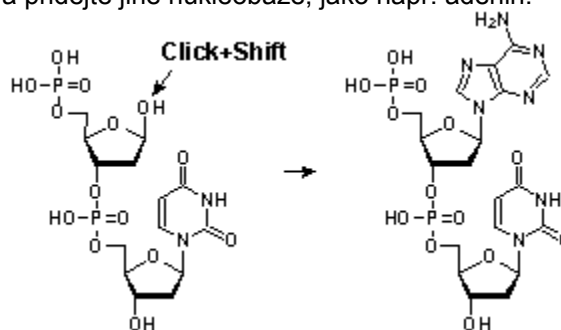


2. Umístěte kurzor myši nad atom označený níže a klikněte přičemž držíte klávesu SHIFT stlačenou (click+shift):



Pozn. Můžete také převrátit stínový obraz šablony před připojením klávesou TAB.

3. Opakujte kroky 1 a 2 a přidejte jiné nukleobáze, jako např. adenin:



Nyní si vyzkoušejte nakreslit DNA či RNA fragment podle svého návrhu.

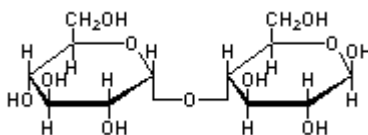
7.6 Kreslení komplexních biomolekul

Následuje několik příkladů kreslení složitějších biomolekul s použitím různých nástrojů ACD/ChemSketch.


7.6.1 Kreslení strukturního vzorce β -maltosy

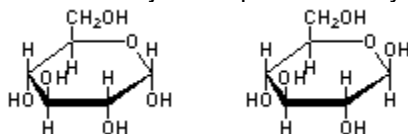



Tato sekce je popsána ve filmu **maltose.exe**, který může být získán na webu na straně ACD ve složce Movies.

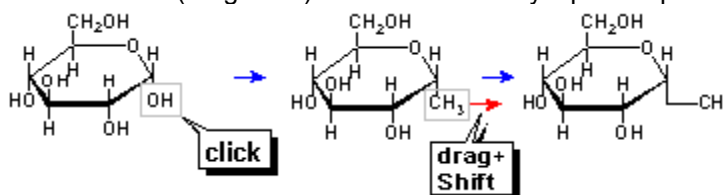


1. Přepněte plochu do módu a vyčistěte ji od všeho, co jste předtím nakreslili.

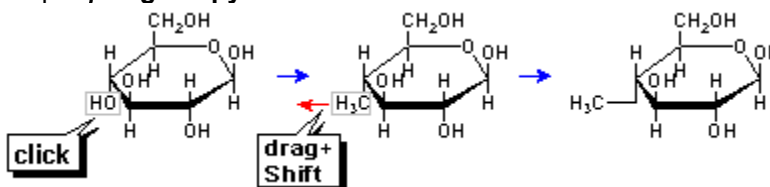
- V oknu šablon  zvolte záložku **Sugars: alfa-D-Pyr**, a potvrďte, že chcete Haworthovy vzorce: . Pokud se rozhodnete jinak, zvolte z rozvinovacího menu jinou možnost.
- Klikněte na **α -D-Glucopyranose** a zvolte ji a přeneste na pracovní plochu.
- Opakujte kroky 1-3, leč tentokrát zvolte záložku beta-D-pyranose **Sugars: beta-D-Pyr** a vyberte **β -D-Glucopyranose**
- Klikněte do okna ChemSketch a umístěte ji vedle první struktury.




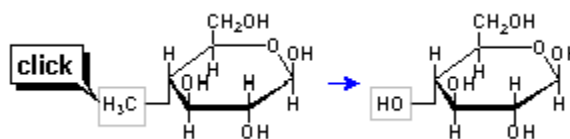
- Stiskněte knoflík **uhlík** . Poté klikněte (click) na označený atom v **α -D-glukopyranose** a nahraďte hydroxyl skupinou CH_3 a pak z této skupiny CH_3 tahněte (kreslete) doprava vazby stále držíce klávesu SHIFT (drag+shift) a nakreslete vazby v přesně pravém úhlu:




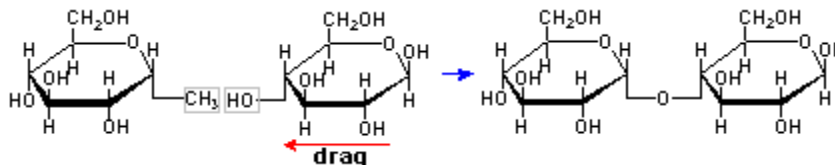
- Zopakujte krok 3 pro **β -D-glukopyranosu**:



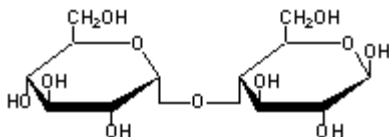
- Stiskněte knoflík **kysíku**  a klikněte na označený atom v **β -D-glukopyranose**:



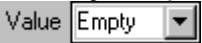


- Zvolte nástroj . Klikněte na pracovní plochu vedle (avšak nedotkněte se jí) **β -D-glukopyranosu** a vyberte ji. Umístěte kurzor myši nad jakýkoliv atom nebo vazbu vybrané struktury a tahněte (drag) jí doleva tak, až se překryjí odpovídající OH a CH_3 skupiny navzájem:



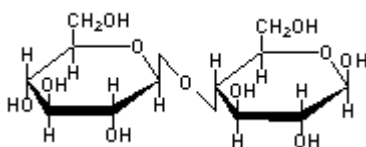
- Je-li třeba, můžete způsobit, že jednotlivé vodíky (C-H) nebudou zobrazeny tak, že zvolíte povel **Remove Explicit Hydrogens** z nabídky **Tools**:



Pozn. Přestože atomy uhlíku na struktuře nejsou representovány chemickou značkou jsou stále přítomny. Pokud je důležité znát chemickou informaci v uzlovém bodu struktury (konektivního grafu), například pro výpočet molekulární hmoty, můžete je z kresby “formálně odstranit” tak, že se zvoleným nástrojem výběru  dvakrát klikneme na zvolený atom. Objeví se panek **vlastnosti (Properties)**, klikněte na záložku **Atom**, potom na knoflík **symbol atomu (Atom Symbol)**  a z roletové nabídky **hodnota (Value)** zvolte **prázdný (Empty)** . Klikněte na **použít (Apply)**.



Nyní si nakreslete následující strukturu sami a použijte při tom to, co je výše vyloženo:



β -Cellobiosa

7.7 Definování uživatelských šablon

Je velmi snadné převést soubor ChemSketch na šablonu (Template). Od léta 1998 nabízí společnost ACD sadu šablon zdarma, samozřejmě kromě těch, které jsou implementovány v samotném ChemSketch, tyto šablony navíc mohou být získány z webové strany ACD.⁴ Tam byla zřízena výměnná strana šablon. Pokud máte šablonu, kterou byste chtěli sdílet s ostatními, dejte vědět!

⁴ Prozkoumejte záložku “Template” na straně ACD/ChemSketch freeware, zda požadovaná šablona existuje, ne-li pokračujte na http://www.acdlabs.com/download/download_templates.html.

Určit soubor ChemSketch jako šablonu je snadné, doporučujeme tento postup:

1. Zapište struktury, které jste nakreslili jako soubor SK2 do složky **Templates** NEBO otevřete soubor SK2, který vás zajímá v ChemSketch.
2. Z nabídky **šablony (Templates)** zvolte **zapsat šablonu (Save User Template)**.
3. V dialogovém okně **Save User Template** napište jméno souboru šablon, např. „alkaloids” a zvolte cestu k podadresáři šablon, např. „C:\ACD45\Templates\alkaloids.sk2.” Klikněte **OK**.

Pozn. Název souboru může být přímo podle vaší úvahy, např. b_d_fur.sk2 nebo ještě lépe cukry: beta-D-furanosy.

Jakmile je soubor zapsán do správného adresáře, jeho jméno se automaticky přidá do seznamu šablon v **okně šablon (Template Window)** (který se utváří z nabídky **Templates**).

Pozn. Můžete také přeměnit libovolný soubor na šablony ikdyž není otevřen. Z nabídky **Templates** zvolte **Template Organizer**. Klikněte na knoflík **New...**, najdete zvolený dokument a přiřadíte mu název.

7.7.1 Pomůcka úpravy okna šablon

Pomůcka úpravy okna šablon (**Template Window Organizer**) je velmi užitečný nástroj pro zacházení se soubory šablon (templátů): oběma jejich druhy, tj. těmi, které jste obdrželi s dodávkou software a těmi, které jste si vytvořili sami. Bude to trvat jenom minutku a uschováte svůj vytvořený ChemSketch dokument jako šablonu. Všimněte si, že jediný rozdíl mezi souborem šablon a souborem ChemSketch *.SK2 tkví ve faktu zda je v Template Window Organizer jako šablona označen nebo není. Uschování souborů tímto způsobem má několik výhod.:

- Vaše soubory *.sk2 roztroušené po celém disku v různých adresářích budou soustředěny na jednom místě (Template Window Organizer).
- Budete moci přiřadit souboru jméno, které bude lépe vystihovat jeho obsah než jeho jméno jakou souboru. To vám dovolí se následně v souborech lépe orientovat.
- Budete moci do souboru rychle nahlédnout jeho rychlým zobrazením v Preview Area z vašeho okna šablon (Template Window).
- Budete moci rychle otevřít vybraný soubor ze seznamu pouze kliknutím na tlačítko **Open Document** z Template Window Organizer.
- Budete moci mít najednou přístup k 15 šablonám prostřednictvím Template Window.

Můžete si s uživatelskou šablonou vyzkoušet následující:

- ⇒ Pozměňte šablonu. Z nabídky Template List (z **Template Organizer**) zvolte příslušnou šablonu a klikněte na tlačítko **Open Document**. Provedte změny a soubor uschovejte.
- ⇒ Překopírujte kteroukoliv část vaší šablony na pracovní plochu (Structure or Draw mode) bez otevírání celého dokumentu. K tomu najdete svoji šablonu z nabídky Template List (z **Template Window**) a klikněte na objekt který chcete na plochu přenést.

7.7.2 Soubor Template.cfg

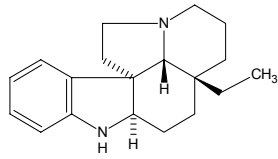
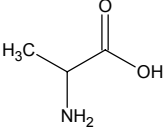
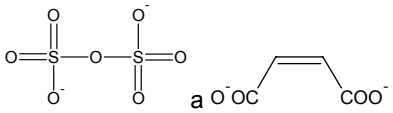
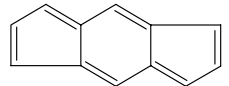

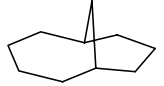
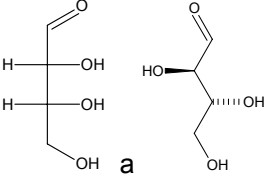
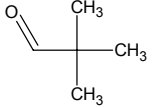
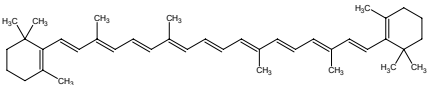
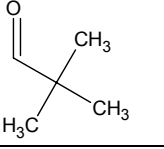
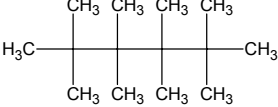
Klíčem k práci se šablonami je soubor **template.cfg**. Tento soubor poskytne programu ChemSketch informaci, že .SK2 soubor je šablona a nikoli jen „obyčejný“ obrázek. Může být otevřen a editován v textovém editoru, nicméně je velmi nepravděpodobné, že byste to potřebovali dělat. Template Window přistupuje k „template.cfg” a určuje, které soubory zobrazit jako šablony. Pokud není .SK2 soubor zobrazen v Template Window, bude doplněn do „template.cfg” když otevřete SK2 jako normální soubor ChemSketch a zvolíte pokyn uchovat jej

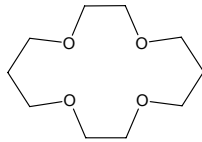
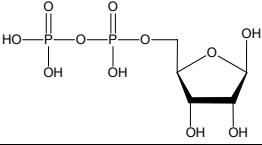
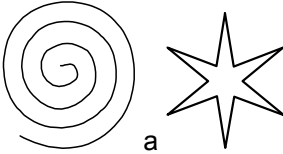
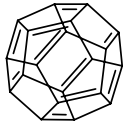
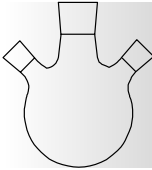

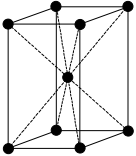
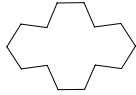
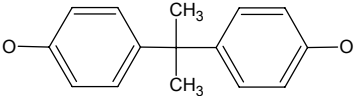
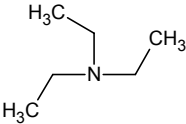
jako šablonu (save as a user template).

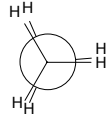

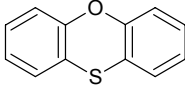
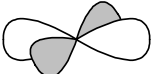
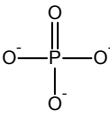

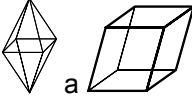
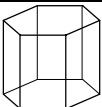

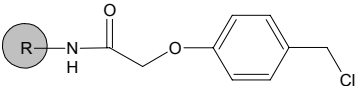
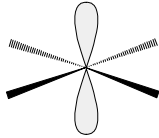
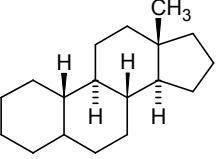
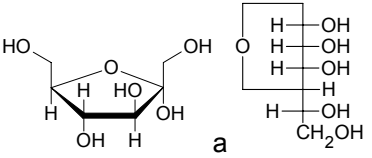
Pokud je soubor **template.cfg** poškozen, přemístěn či ztracen, nezobrazí **Template Window** žádné šablony. Pokud jej najdete (pomocí Windows Explorer, nebo pomocí programu hleděj soubor) může být obnoven do předvoleného podadresáře nebo do uživatelského adresáře. Pokud jej nelze nalézt je nutno jej obnovit novou instalací ChemSketch anebo novým vytvořením každé šablony, jak je popsáno výše.

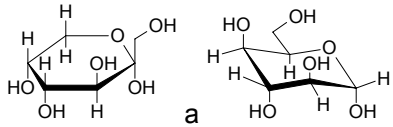
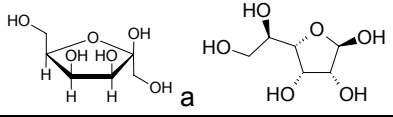
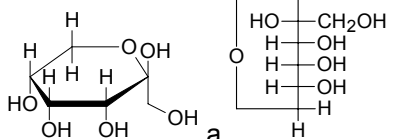
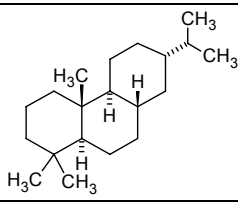
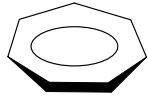
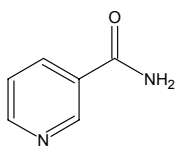
7.7.3 Hotové šablony

Koncem roku 2000 byly k dispozici následující šablony, dodávané s komerční i freewareovou verzí ChemSketch. Nalžete je ve složce šablon (Template) po instalaci. Pokud nenaleznete šablonu, kterou hledáte v Template Window, budete ji muset vybrat. (Vybrat můžete pouze 15 šablon, neboť v okně je předvoleno pouze tolik řádků.)

název	soubor	popis	vzorek
Alkaloids	alkaloid.sk2	11 stran vzorců alkaloidů, uspořádaných abecedně podle triviálního názvu	
Amino Acids	aminacid.sk2	2 strany vzorců, řazených jako molekuly a C-substituenty, se jmény a 3-písmennými zkratkami	
Anions - Novinka!	anions.sk2	2 strany, anorganické a organické anionty se jmény a molekulovými vzorci	
Aromatics	aromatic.sk2	1 strana, hlavně 5- a 6-členné anelované kruhy se jmény	
Arrows	arrows.sk2	2 strany velkých, zahnutých, barevných a složitých šipek	
Bicyclics	bicycles.sk2	1 strana obsahující struktury s 2 a více kruhy, většinou s názvy	
Carbohydrates	sugars.sk2	3 strany Haworthových, Fisherových a projekčních vzorců cukrů s názvy (viz. též 'Sugars' níže)	
Carbonyls	carbonyl.sk2	1 strana strukturních fragmentů s karbonyly	
Carotenes	carotene.sk2	5 stran konjugovaných alkenů s názvy	
C-Groups	c_groups.sk2	1 strana strukturních fragmentů se vzorci	
Chains	chains.sk2	2 strany nasycených (se jmény) a nenasycených (beze jmen) řetězců	
Chem Quiz	chemquiz.sk2	2 strany textu a obrázků, znázorňujících možné uspořádání testovacích oráček na položky z jiných šablon	

název	soubor	popis	vzorek
Crown Ethers	crowns.sk2	1 strana etherických kruhů, pouze 2D, se jmény	
DNA/RNA Kit	nucleo.sk2	2 strany pojmenovaných strukturních komponent DNA. Viz. též DNA Builder z balíčku Goodies (Sekce 13.3).	
Figures	set.sk2	1 strana různých obrázků, DNA, micel, aj.	
Fullerenes	fuller.sk2	1 strana nasycených a nenasycených fullerenů	
Lab Kit - Enhanced!	kit.sk2	7 stran běžných druhů laboratorního vybavení s názvy	
Labels	labels.sk2	1 strana výstražných nálepek	
Lattice	lattice.sk2	1 strana standardních krystalových typů s názvy	
Lewis Structures	lewistr.sk2	1 strana popisující jak kreslit Lewisovy diagramy a 1	$\cdot\ddot{\text{Cl}}\cdot \text{Mg}^{2+} \cdot\ddot{\text{Cl}}\cdot$
Monocyclic Alkanes	cycloalk.sk2	1 strana uhlíkatých kruhů 3-20	
Monomer Templates	monomers.sk2	3 strany stavebních bloků běžných polymerů bez názvů	
N-Containing Groups	n_groups.sk2	1 strana pojmenovaných strukturních fragmentů s dusíkem	

název	soubor	popis	vzorek
Newman Projections	newmans.sk2	2 stran konformací (anti, gauche, eclipsed a staggered)	
N-Rings	n_rings.sk2	3 strany pojmenovaných mono-, bi- a tricyclických kruhů s dusíkem	
O- and S-Rings	os_rings.sk2	1 strana pojmenovaných mono-, bi- a tricyclických kruhů s kyslíkem a sírou	
Orbitals	orbitals.sk2	2 strany s, p, d, sigma a pi malých a velkých orbitalů	
Phosphorus Compounds	phosphor.sk2	1 strana pojmenovaných struktur s fosforem	
Polycyclics	polycycl.sk2	1 strana mostovaných, nasycených a kondenzovaných struktur s názvy	
Polygons	polygons.sk2	1 strana geometrických tvarů	
Polylines	polyline.sk2	1 strana geometrických tvarů	
Reaction Symbols	reacsym.sk2	1 strana běžných symbolů	ΔG^\ddagger
Rings	rings.sk2	1 strana 5- a 6-členných kruhů	
SP Synthesis Resins	linkers.sk2	1 strana pojmenovaných fragmentů pryskyřic, navázaných na pevnou fázi	
Stereo Templates	conform.sk2	1 strana obrázků prostorových struktur (ne molekul) k výkladu stereo konformací	
Steroids	steroid.sk2	3 strany steroidů, s triviálními názvy	
Sugars: alpha-D-Fur	a_d_fur.sk2	3 strany s 5-člennými cukry, s Haworthovými, prostorovými a Fisherovými projekčními vzorci, s názvy	

název	soubor	popis	vzorek
Sugars: alpha-D-Pyr	a_d_pyr.sk2	4 strany s 6-člennými cukry, s Haworthovými, prostorovými a Fisherovými projekčními vzorci, s názvy	
Sugars: beta-D-Fur	b_d_fur.sk2	3 strany s 5-člennými cukry, s Haworthovými, prostorovými a Fisherovými projekčními vzorci, s názvy	
Sugars: beta-D-Pyr	b_d_pyr.sk2	4 strany 6-členných cukrů s Haworthovou, stereo-, židličkovou a Fisherovou projekcí s názvy	
Terpenoids	terpen.sk2	5 stran terpenů s názvy	
Tipped Rings	tipped.sk2	1 strana s kruhy v perspektivě	
Vitamins - New!	vitamins.sk2	3 strany vitamínů od A do U s názvy	 <p>vitamin B₃</p>

8. Tvorba grafických objektů

8.1 V kapitole probereme

V této kapitole se seznámíme s tvorbou grafických objektů, tudíž se před další prací přepneme do módu kreslení (Draw).

Naučíme se, jak použít nástroje Draw mode k vytvoření následujících objektů:

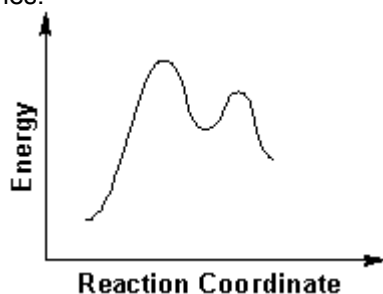
- energetický průběh reakce;
- různé orbitaly;
- vakuový destilační přístroj;
- DNA se dvěma řetězci;
- lipidy a micely; a
- plakáty (postery) skládající se z několika archů papíru.

Naučíme se také, jak tvořit z vašich grafických děl soubory PDF, univerzálně čitelné pomocí Adobe Reader freeware programu.

8.2 Kresba energetického reakčního diagramu



Tato kapitola je obsažena ve filmu **diagram.exe**, který může být downloadován z Webu společnosti ACD, ze složky Movies.



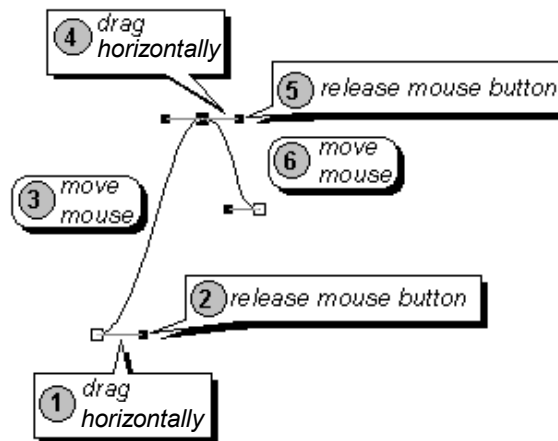
Přepněte do kreslicího módu (**Draw**) a zvolte nástroj **Polyline** 

8.2.1 Kreslení křivek

1. Táhněte (se stisknutým levým tlačítkem myši) horizontálně doprava od počátku křivky a natahněte ovládací linku.
2. Povolte tlačítko myši.
3. Pohybuje myší nahoru a vytahněte první segment křivky.
4. Tahněte horizontálně doprava a natahněte ovládací linku. Změnou délky ovládací linky

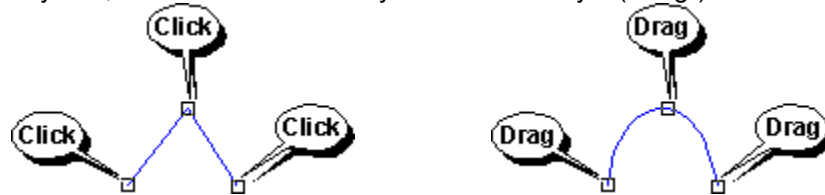
měníte segment křivky.

5. Povolte tlačítko myši.
6. Tahněte myší dolů a nakreslete další segment.



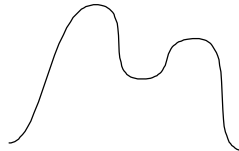
7. Opakujte kroky popsané výše a nakreslete další dva segmenty.
8. Klikněte pravým tlačítkem a ukončete kreslení křivky.



Tip Pokud kreslíte pomocí nástroje polyline, je dobře si pamatovat, že “klik” vytvoří koncový bod, bod zvratu anebo ostrý úhel. Tažení myší (“drag”) vytvoří křivku:

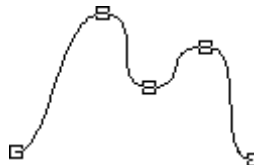


8.2.2 Úprava křivky

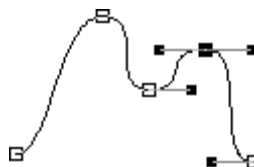
Poprvé, když budete kreslit s nástrojem **Polyline** můžete mít určité potíže s nakreslením tvaru, který máte na mysli. Zkusme si to, nakreslete křivku asi takovouhle:



1. Pokud není křivka zvolena jako objekt, klikněte na nástroj **Select/Move**  a pak klikněte na křivku samu.
2. Klikněte na nástroj úpravy uzlových bodů **Edit Nodes** . Na křivce budou zobrazeny uzlové body (nodes) čáry, které je možno upravovat:



3. Klikněte na předposlední „čtvereček“ vyznačený na křivce a zobrazí se příslušející ovládací čáry:





4. Pohybováním ovládacích čar (prodlužováním, zkracováním, změnou polohy jejich koncového bodu) změníme tvar okolí uzlu, případně jiných uzlů, podle přání. Vyzkoušejte si to.

Tip Pokud používáte nástroj **Edit Node**, můžete manipulovat uzly ovládacími prvky, které se objeví na liště. Například, můžete zvojit několik uzlů (s tlačítkem SHIFT) a zarovnat je tlačítkem na liště podle přání.

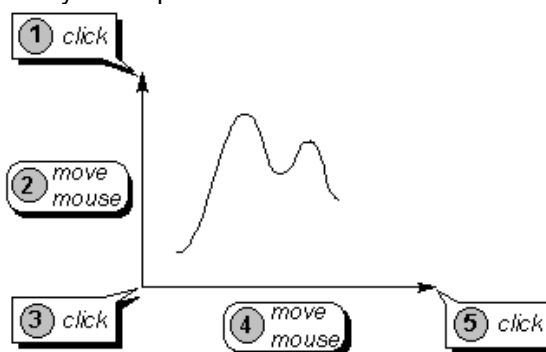
8.2.3 Kreslení os X a Y

Ujistěte se, že používáte nástroj **Polyline** .

Zvolte nástroj kreslení šipek **Draw Arrow** . V panelu šipek **Arrow** z nabídky **Arrow Type**

 zvolte šipku s dvěma hroty .

1. Klikněte na koncový bod osy Y.
2. Pohybuje myší „svisle“ a nakreslíte osu.
3. Klikněte a zajistěte tak bod průsečíku os.
4. Pohybuje myší „vodorovně“ doprava a nakreslete osu X.
5. Klikněte a koncový bod osy X se upevní.



6. Klikněte na pravé tlačítko myši a ukončete tak kreslení os.

Tip Osy snadno nakreslíte pravouhlé, pokud před kreslením zvolíte nástroj uchycení objektů k podkladové síti **Snap on Grid** anebo si síť zobrazíte pokynem **Show Grid** (z nabídky **Options**); přirozeně, můžete udělat i oboje najednou.

7. Přidejte popisky v nástroji **Text**  a otočte je nástrojem **Rotate 90°** .




Zkuste si náročnější kousek. Nástrojem **Text** napište slovo na pracovní plochu. Změňte velikost písma na 36 bodů (points), a vybarvěte je na žluto. Nyní, za použití nástroje **Polyline** napište psacím písmem totéž slovo přes ně. (Nápověda: “pište” tak nejlépe jak umíte a pak čáru písma upravte nástrojem **Edit Nodes**.)

Chemistry


8.3 Kreslení různých orbitalů



Tato část manuálu je podobná jako film **orbital.exe**, který může být získán z Webové stránky ACD pod záložkou Movies.

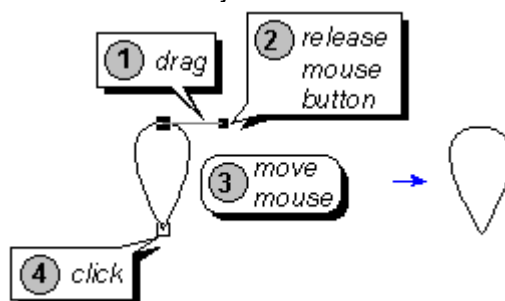
Ujistěte se, že v programu máte zvolen mód .


8.3.1 Nakreslíme p-orbital



Chceme-li nakreslit orbital , budeme postupovat následujícím způsobem:

Zvolíme nástroj **Polygon** .

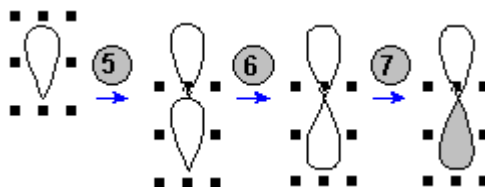
1. Tahněte horizontálně myší doprava od horního „okraje“ orbitalu abychom natáhli ovládací čáru.
2. Povolte tlačítko myši.
3. Pohybuje myší dolů a nakreslete tělo orbitalu.
4. Pravým kliknutím zobrazení orbitalu fixujete.






Poznámka Pokud je tvar křivky odlišný od toho, jak jste si ji představovali, upravte ji nástrojem úpravy uzlových bodů **Edit Nodes** .

5. Aniž pohnete myší, klikněte na pravé tlačítko myši dvakrát a ukončete kreslení orbitalu a otevřete nástroj **Select/Move/Resize** . Umístěte kurzor nad zvolený orbital a držíce stisknutou klávesu CTRL tahněte dolů a okopírujte nakreslený orbital.
6. Nástrojem převracení **Flip Top to Bottom**  převraťte spodní segment orbitalu. Srovnejte obě části pod sebe tak, že spodní segment posunete pod horní.
7. Přenesením cursoru na šedou barvu v paletě barev **Color Palette** (na spodním okraji pracovní plochy) a následným kliknutím na levé tlačítko myši vybarvíme spodní segment

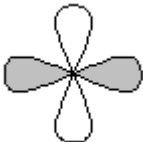
došeda.




Tip Abychom rychle zarovnali oba segmenty na společnou osu můžeme je oba zvolit a srovnat jejich pozici nástrojem centrování **Center Horizontally** .

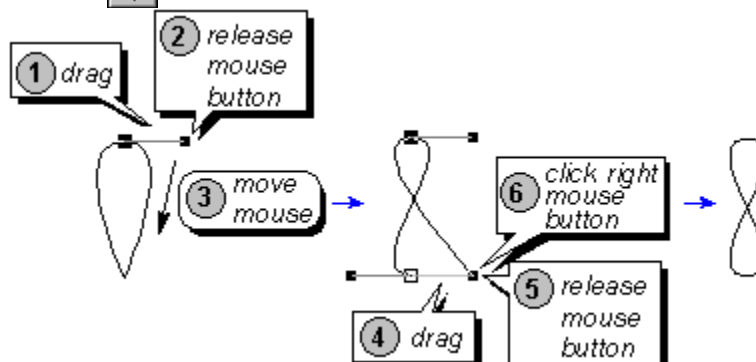
- Zvolte oba segmenty a kliknutím na nástroj seskupování **Group**  z nich uděláme jeden objekt. Nyní můžete manipulovat s oběma segmenty najednou, například s nimi nástrojem otáčení **Select/Move/Rotate** .

8.3.2 Kreslíme d-orbital

Abychom nakreslili orbital  budeme postupovat následovně:

Zvolte nástroj **Polygon** .

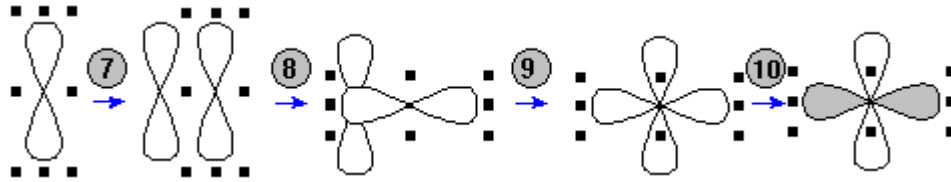
- Tahněte horizontálně myší doprava od horního „okraje“ orbitalu abychom natáhli ovládací čáru.
- Povolte tlačítko myši.
- Pohybujte myší dolů a nakreslete tělo orbitalu.
- Tahněte horizontálně myší doprava od dolního „okraje“ orbitalu abychom natáhli ovládací čáru. Pověšimněte si, že snadno nakreslíte oba laloky stejné, když ovládací čárky budou mít stejnou délku a budou rovnoběžné.
- Povolte tlačítko myši.
- Klikněte na pravé tlačítko myši a ukončete kreslení segmentu orbitalu a zvolte nástroj **Select/Move/Resize** .






Tip Nakreslit symetrickou druhou část orbitalu bude snazší, pokud před kreslením aktivujete funkci kreslení na čtverečkovém papíře **Snap on Grid** (menu **Options**).

- Zvolte orbital a držíce klávesu CTRL tahněte myší a nakreslete kopii.
- Zvolte nástroj otáčení **Rotate 90°**  a otočte kopii orbitalu.


9. Přemístěte orbital na místo.
10. Ukažte na šedou barvu v paletě barev myši (**Color Palette**) a klikněte levým tlačítkem myši, čímž segment orbitalu vybarvíte:





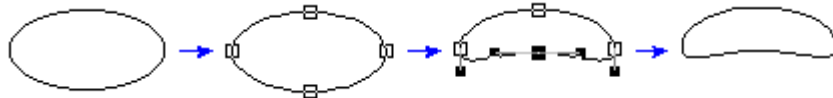
Tip Opět můžete segmenty snadno vystředit tak, že je oba zvolíte a použijete nástroj **Center Horizontally** .



11. Zvolte oba segmenty orbitalu a spojte je do skupiny nástrojem **Group** . Nyní lze orbitalem zacházet jako s jedním objektem; vyzkoušejte si to při otáčení nástrojem **Select/Move/Rotate** .

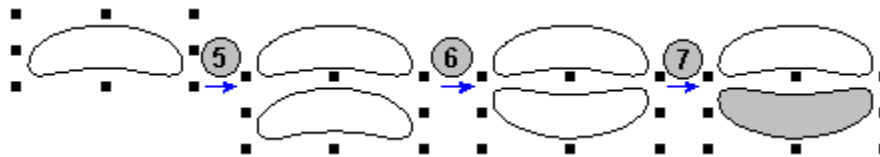
8.3.3 Kreslíme π -orbital


K tomu abychom nakreslili orbital  učiníme následující:


1. Aktivujte nástroj **Ellipse**  a tažením na pracovní ploše nakreslíme elipsu.
2. Z nabídky **Objects** vybereme pokyn **Convert to Polyline**.
3. Zvolíme nástroj **Edit Nodes** .
4. Tvar elipsovité změnil na rohlíkovitý tím, že spodní uzel křivky přemístíme nahoru.



5. Klikneme na pravé tlačítko myši a zvolíme nástroj **Select/Move/Resize**  a po zvolení objektu držíce klávesu CTRL tažením myši vytvoříme kopii.
6. Nástrojem překlápění **Flip Top to Bottom**  jej překlopíme.
7. Zvolíme šedou na **Color Palette** a kliknutím na levé tlačítko myši vybarvíme segment orbitalu na šedivo.



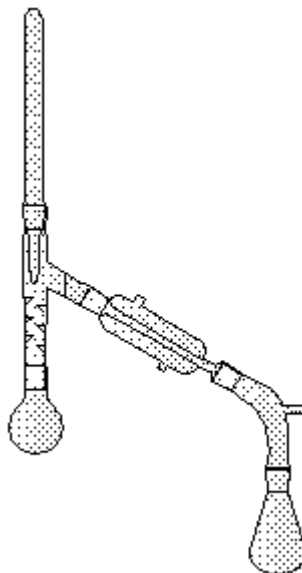
Tip Opět orbitaly vystředíme nástrojem **Center Horizontally** .

8. Vyberte oba segmenty orbitalu a kliknutím na tlačítko **Group**  z nich uděláme spojený objekt.

8.4 Kreslíme vakuovou destilační aparaturu





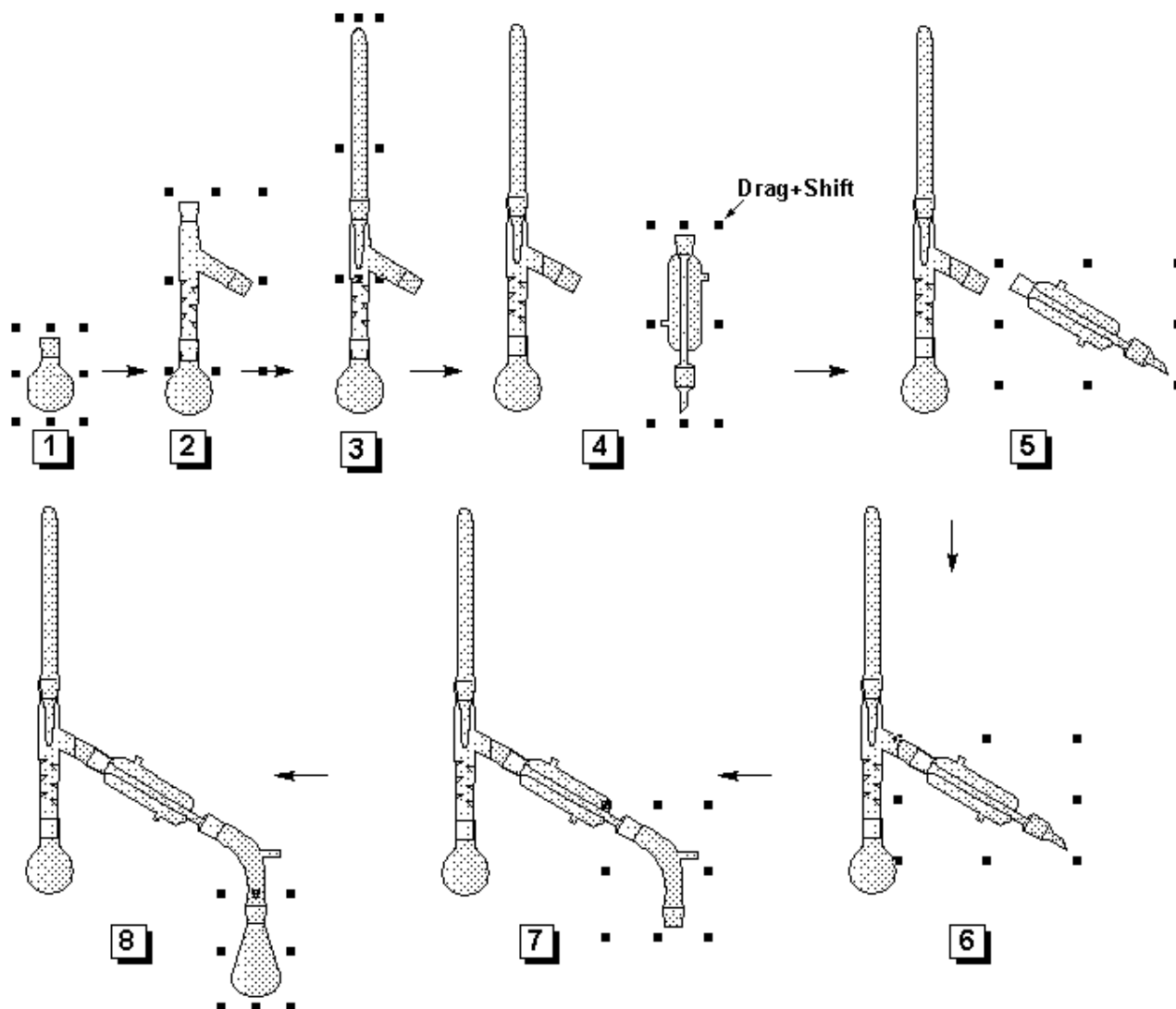
Tato sekce je shodná jako film **apparat.exe**, který lze získat na Webové straně ACD pod záložkou Movies.



Přepněte se do modu **Draw** a nastavte zvětšení na 50 % (zoom).

V okně šablon **Template Window**  zvolte **Lab Kit** za seznamu **Template List**.

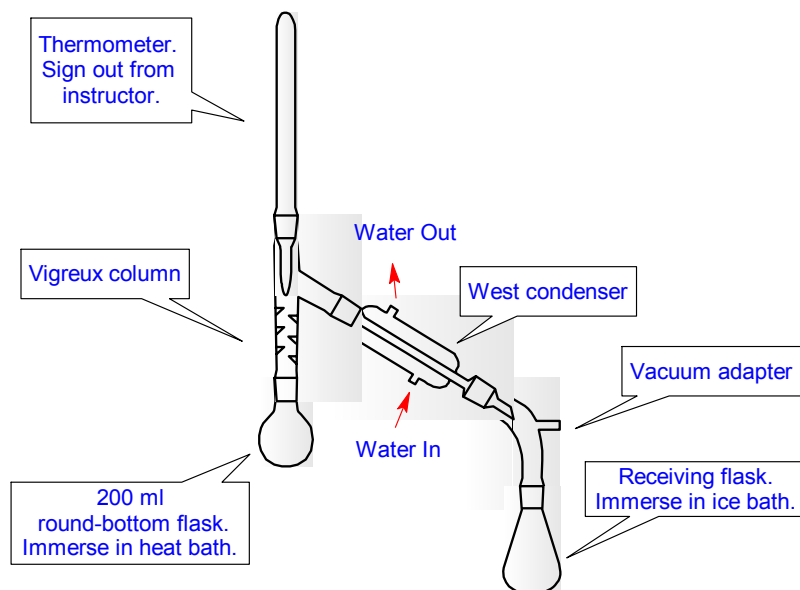
1. Zvolte kulatou baňku tím, že na ní kliknete. Následně klikněte na pracovní plochu, čím ji tam přenesete. Klikněte na pravé tlačítko myši a ukončete režim přenášení šablon.
2. Otevřete šablony **Template Window**. Zvolte nástavec s Vigreuxovou destilační kolonkou. Připojte jej k baňce kliknutím na ní a na pravé tlačítko myši.
3. Podobně přidejte teploměr, Liebigův chladič. Tento přiojíte do správné polohy tak, že si jej nejprve umístíte vedle aparatury a otevřete nástroj **Select/Move/Resize** .
4. Klikněte na libovolný bod ovládání vybraného objektu (černé čtverečky kolem objektu, v tomto případě chladiče) aktivujte nástroj rotace **Select/Move/Rotate** . Otočte chladičem cca o 73° proti směru hodinových ručiček tažením ovládacího bodu. Informace o úhlu natočení se automaticky objeví u kursoru. (Tato funkce musí být aktivována v záložce **General** dialogového boxu **Preferences** (menu **Options**)).
5. Chladič pak připojte k aparatuře.
6. Připojte vakuovou alonž.
7. Kreslení ukončete připojením vhodné baňky jako předlohy.



8.4.1 Opatření kresby popisky

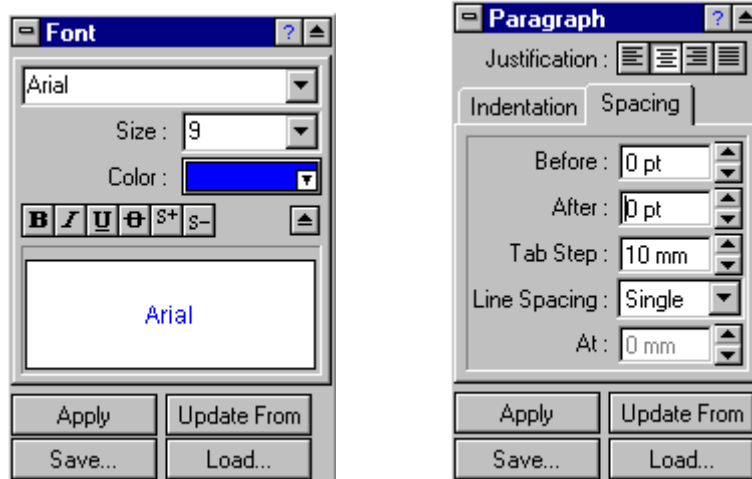
ACD/ChemSketch umožňuje nakreslit mnoho účelných sestav laboratorního vybavení. Šablona **Lab Kit** byla několikrát doplněna byretami, kádinkami, vařiči, kahany etc., takže můžete nakreslit téměř všechny podrobnosti o vašem experimentu.


Vezměme jako příklad, že kreslíte obrázek pro skripta k základnímu praktiku. Bude proto vhodné upozornit studenty na některé aspekty aparatury a připomenout jim správné názvy či místo, kde se v laboratoři nacházejí:

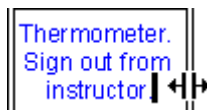



8.4.1.1 Přidání textových popisků

1. Nejprve zvolíme řez písma (font) pro text. Z nabídky **Tools** zvolte **Font Panel** a **Paragraph Panel**. Zvolte například následující nastavení:

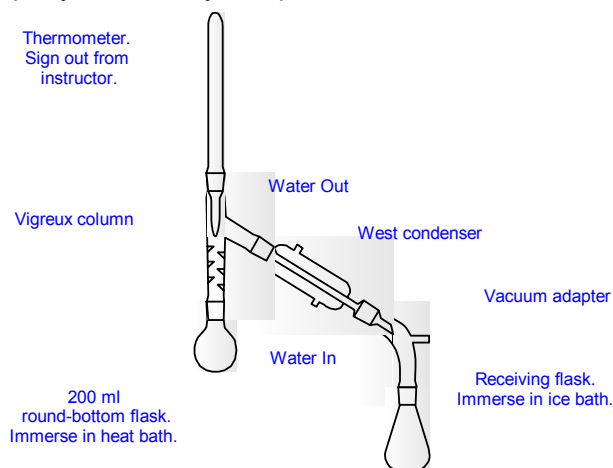


2. Zvolte nástroj **Text**  na levé liště kreslicích nástrojů a klikněte vedle teploměru. Můžete do textového pole například *Thermometer. Sign out from instructor.* Pro vyrovnání textu v poli roztáhněte jeho pravý okraj:




Tip Pokud se vám náhodou stalo, že jste klikli mimo textové pole a jeho editace se tím ukončila, můžete ji opět zahájit tak, že zvolíte nástroj **Edit Text**  na horní liště úprav. Vybraný text se aktivuje v textovém boxu. Pokud nebyl žádný text předem vybrán, prostě na zvolený text klikněte.

3. Klikněte mimo editované pole a ukončete úpravy textu.
4. Opakujte kroky 2 a 3 a přidejte další popisky.
5. Pokud to je třeba popisky můžete kdykoliv přemístit:



8.4.1.2 Popisky v bublinách

Nyní si ukážeme, jak umístit popisky do komiksových bublin (callouts).

1. Nalevo, na liště nástrojů pro kreslení klikněte na pravý roh (lépe řečeno na malý trojúhelníček v jeho rohu) knoflíku **Callout**  aby expandoval a ukázal všechny možnosti kreslení bublin. Z těchto možností vybereme obdélníkovou popisku:



2. Jak budete poté pohybovat kurzorem uvidíte, že se bublina objeví kolem kteréhokoliv objektu na který ukážete. Ukažte na popisek, klikněte a bublina se umístí kolem něj:



3. Následně umístěte všechny vybrané popisky do komiksových bublin. Tento mód ukončíte tak, že kliknete na volný prostor na pracovní ploše.

8.4.1.3 Úprava tvaru bublin

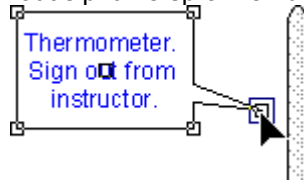
Nyní upravíme bubliny tak, aby jejich šipky ukazovaly na žádané objekty.

1. Zvolte některou bublinu kurzorem kliknutím na ni. Zvolte nástroj úprava uzlových bodů **Edit**


Nodes  z lišty editovacích nástrojů. Objeví se uzlové body i na bublině:




2. Tažením můžete nyní přetahnout šipku ke správnému objektu:



Tip Změnou polohy rohových uzlů změnáte tvar a velikost bubliny.

3. Aniž opustíte mód úpravy uzlových bodů klikněte na další bublinu a upravte ji podle přání.
4. Poté, co upravíte všechny bubliny, klikněte na prázdné místo na pracovní ploše a ukončíte editování.
5. Nástrojem kreslení šipek **Draw Arrow**  doplníme šipky označující přívod a odvod vody.
6. Zvolte obě nakreslené šipky a klikněte dvakrát. Objeví se panel **Objects**. Zvolte červenou barvu pera (pen color) a klikněte na **Apply**.

8.4.1.4 Seskupování prvků a rušení skupin

Aby se choval celý nakreselný obrázek jako jeden objekt zvolíme vše nakreslené pokynem „vyber vše“ CTRL+A a klikněte na nástroj seskupování **Group**  z nástrojové lišty editování. Nyní můžete kopírovat, pohybovat a měnit velikost všemi částmi obrázku najednou bez rizika, že na některou část zapomenete.



Pokud se později rozhodnete, že upravíte kteroukoliv část seskupeného obrázku, jednoduše jej vyberete a zrušíte seskupení nástrojem **Group** .

8.5 Kreslení dvoušroubovice DNA




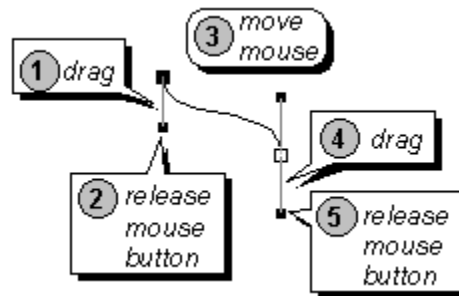
Tato sekce je shodná s filmem **dna_ch.exe**, který můžete získat na Webu ACD, pod záložkou Movies.



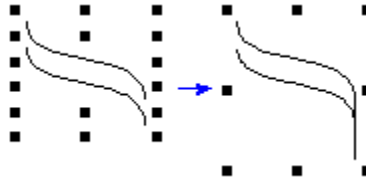
Přepneme se do kreslicího módu **Draw**  a zvolíme nástroj **Polyline** .





1. Z výchozího bodu tahneme svisle a vytahneme ovládací čáru.
2. Uvolněte knoflík myši.

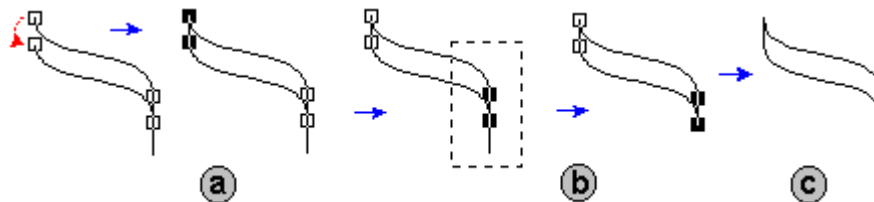
3. Pohybujte myší doprava a nakreslete křivku.
4. Tahněte dolů a vytahněte ovládací čáry. Změnou délky těchto čar můžete modifikovat tvar křivky.
5. Uvolněte tlačítko myši a klikněte na pravé dvakrát, čímž ukončíte kreslení křivky a aktivujete nástroj **Select/Move/Resize** .





6. Umístěte kurzor nad zvolenou křivku a držíc klávesy CTRL+SHIFT, tahněte dolů (stisknutá klávesa CTRL při tažení objektem zanechává na původním místě kopii, zatímco stisknutá klávesa SHIFT umožní pouze pohyb po vertikále či horizontále).
7. Zvolte obě křivky tím, že kolem nich přetáhnete obdélník výběru anebo kliknutím postupně na obe se stisknutou klávesou SHIFT, zvolte nástroj spojení čar **Connect Lines** (z nabídky **Object**) a pravé konce křivek se propojí čarou.

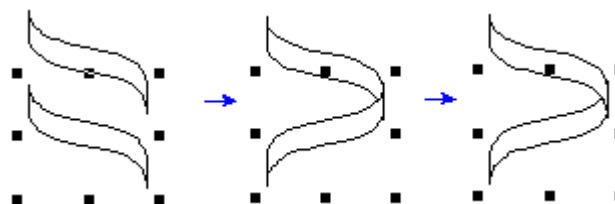



8. Otevřete nástroj editace uzlů **Edit Nodes**  z horní lišty a postupujte následovně:
 - a) Klikněte na knoflík spojení vertikál **Connect Vertices**  aby se konce v uzlech spojily čarou.
 - b) Zvolte oba pravé uzly tím, že přes ně přetáhnete obdélník volby. Klikněte na nástroj převed' na čáru **Convert to Line** .
 - c) Klikněte na pravé tlačítko myši a opusťte mód **Edit Nodes** a otevřete nástroj **Select/Move/Resize** .



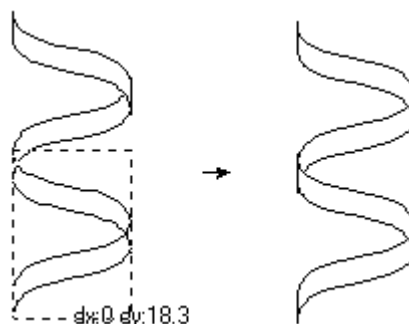
9. Udělejte kopii segmentu tažením za současně stiskutých kláves CTRL+SHIFT tak, jak je popsáno v bodě 6. Klikněte na knoflík převracení zleva doprava **Flip Left to Right**  a

převraťte jej. Nyní jej zarovnejte v pořadí za horní segment nástrojem **Send to Back** .



Tip Může se zdát pracné vyrovnat přesně elementy pod sebe. Snadno se to povede vystředěním nástrojem **Center Horizontally** .

10. Zvolte oba segmenty tak, že kolem nich přetáhnete obdélníkové pole, nebo klikáním a klávesou SHIFT a okopírujte je (CTRL+drag). Umíťte je na správné místo, jak je popsáno výše:



11. Zvolte segmenty označené na obrázku puntíky tak, že na ně kliknete za stisknuté klávesy SHIFT. Klikněte dvakrát na kterýkoliv z nich. Otevře se panel **Objects**. V záložce výplní

Fill specifikujte následující volby:

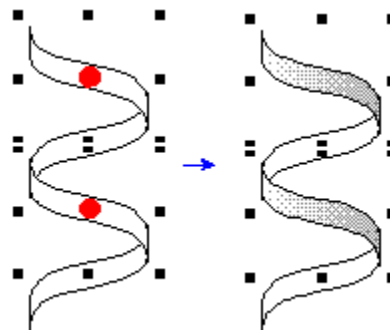
Styl **Style - Shade**  ;

Barva **Color - white**;

Vzor **Pattern** -  ;

Stínování **Shade** - ▾

a klikněte na **Apply**:



12. Zvolte zbývající dva segmenty (označeny křížkem za obrázku níže) a specifikujte následující v panelu **Objects**:

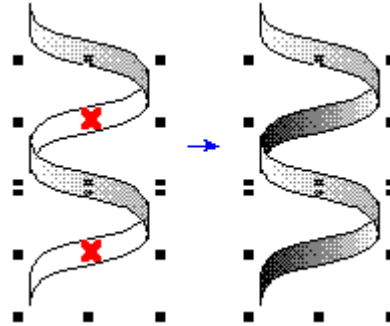
Style - Shade  ;



Color - white;

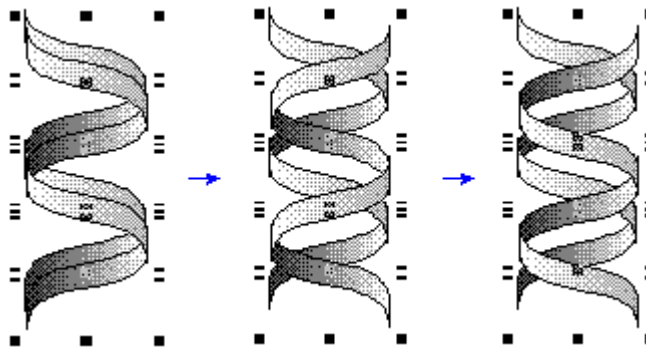
Pattern -  ;


Shade - 95%

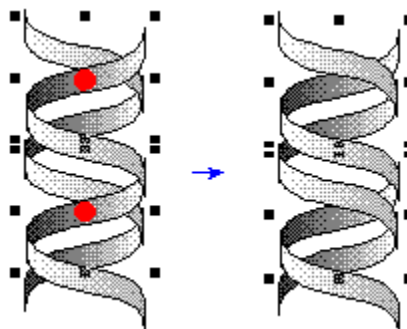
a klikněte **Apply**. Získáme následující spirálu:



13. Zvolte celou spirálu tím, že přes ní přetáhnete obdélník výběru tak, že obsahuje všechny segmenty a udělejte kopii (drag+CTRL). Klikněte na překlopení **Flip Left to Right**  a pak na **Flip Top to Bottom** .



14. Zvolte segmenty označené puntíky na obrázku dole (klik+SHIFT) a klikněte na **Send to Back** . Segmenty se přesunou dozadu.



8.6 Kreslení lipidů a micel




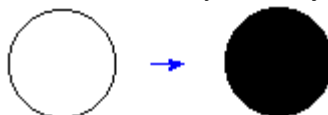
Tato sekce je shodná s filmem **lipid.exe**, který lze získat na Webové straně ACD v záložce Movies.


8.6.1 Kreslení schematu lipidu

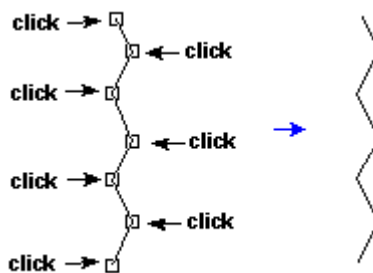


Ověřte si, že jste v módu .

1. Zvolte nástroj **Ellipse** . Tahem na pracovní ploše za současně stisknuté klávesy SHIFT nakreslete kruh.
2. Klikněte na černou barvu na **Color Palette** a vybarvěte jej.






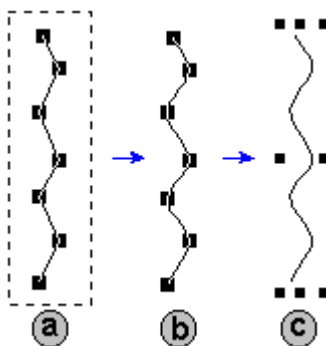
3. Zvolte nástroj **Polyline** . Klikněte opakovaně na pracovní plochu v blízkosti kruhu a nakreslete uhlíkatý řetězec a pak klikněte na pravé tlačítko myši a ukončete kreslení.



Tip Snadno nakreslíme symetrický řetězec při zapnutém **Snap on Grid** a (nebo) **Show Grid** (z nabídek **Options**).



4. Zvolte nástroj **Edit Nodes**  a upravte cikcak čáru takto:

- Zvolte všechny uzlové body na zubatci tak, že kolem ní přetáhnete obdélník výběru. Všimněte si, že vybrané uzlové body zčernají.
- Klikněte na nástroj přechodu na křivku **Convert to Curve**  a pak na nástroj vyrovnaní tvarů **Smooth** .
- Klikněte na pravé tlačítko myši a zvolte **Select/Move/Resize** .



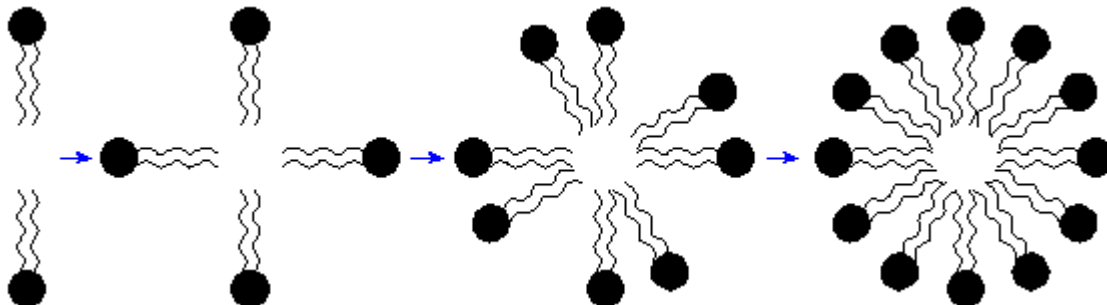
- Umístěte kurzor myši nad křivku a takem za stisknuté klávesy CTRL udělejte kopii.
- Urovňte kresbu jako na obrázku.



Tip Pokud vyberete elementy fosfolipidu a kliknete na nástroj seskupování **Group** , vznikne z nich jeden objekt se kterým můžete např. otáčet vcelku nástrojem **Select/Move/Rotate** .



Zkuste si nakreslit micelu pomocí kopírování (CTRL + táhnout), seskupení, překlopení, otáčení a vystředění:



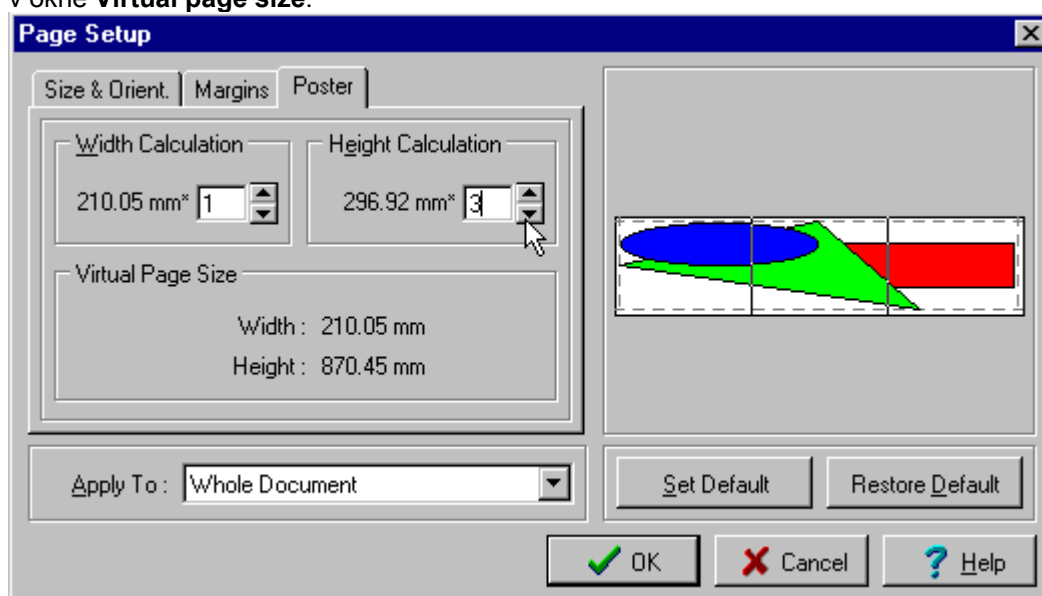
8.7 Kreslíme plakát (poster)


Za použití ACD/ChemSketch můžete rychle nakreslit nástěnku, plakát, transparent či poster a vytisknout je na libovolný formát papíru, či připravit pro velkoplošný tisk ve formátu PDF. ACD/ChemSketch automaticky rozdělí poster, pokud je jeho plocha větší, než papír v tiskárně na několik takových papírů a složí je jako kachličky. Vy je pak již pouze vyvěsíte na plochu.



Tato sekce je znázorněna v prezentaci **poster.exe**, kterou můžete získat na Webové straně ACD pod záložkou Movies.


1. Z nabídky **File** zvolte formátování stránky **Page Setup**.
2. V záložce **Size & Orient** nastavte formát a nastavte možnost, např. „na šířku“ **Landscape**.
3. Zvolte záložku **Poster**. Nastavte sestavu papírů na které se váš poster rozloží. Všimněte si, že vidíte skládání na obrázku vpravo a vypočtenou celkovou velikost složeného posteru v okně **Virtual page size**:



4. V záložce **Margin** nastavte okraje stránky a klikněte **OK**.
5. Nakreslete poster za použití známých nástrojů v modech Structure a Draw. Použijte zobrazení celého posteru knoflíkem **Full Page**  a upravte celkový vzhled posteru.

Pozn. Můžete použít vkládání **Paste** a **Paste Special** z nabídky **Edit** ke vložení objektů (textu, obrazů etc.) vytvořených v jiných programech. Můžete je pak (pokud se zachová příslušná vazba) editovat použitím OLE.

6. V dialogovém boxu **Preferences** (menu **Options**) ze záložky **General**, zvolte v volitelném boxu **Printable Area** sekci okrajů **Borders**, pokud chcete vidět jak bude poster dělen na stránky při tisku.
7. Zvolte **Printer Setup** z nabídky **File**.
8. V dialogu **Select Printer** vyberte **Set Up** a v záložce **Font** zvolte **Print TrueType as Graphics**. Všimněte si, že u různých tiskáren může být tato volba poněkud jinak umístěna. Vždy je nutno zvolit funkci „tisknout True Type písmo jako grafiku“. Klikněte **OK**.

9. Zvolte pokyn tisknout **Print** z nabídky **File** nebo klikněte na knoflík tisku **Print**  na obecné liště a vytiskněte své dílo.

Pozn. Pomatujte, že nastavení tisku je vázáno na definici stránky a tiskárny ve vašem počítači. Pokud se souborem přejdete na jiný počítač, může být nastavení jiné. Dokonce, nový počítač nemusí mít vámi zvolená písma (fonty) a nemusí na něm fungovat všechny OLE vazby.


8.8 Převedení do formátu Adobe PDF – **Novinka verze 5.0!**

ACD/ChemSketch nyní obsahuje nástroj na převedení sk2 souborů do formátu PDF společnosti Adobe. Kterýkoli grafický objekt vytvořený podle výše popsaných postupů může být nyní převeden do formátu souboru Adobe PDF. Soubory PDF slouží jako mezinárodní standard k výměně informací nezávisle na programu ve kterém vznikly a jako moderní předtisková úprava pro tisk. Verze nástroje tvorby PDF souborů implementovaná v ACD/ChemSketch nemusí být postačující pro tento úkol ve všech myslitelných případech; tehdy je nutno sahnout k vlastní utilitě Adobe Acrobat Distiller vč. příslušných nastavení.

Pozn. K převedení souboru do formátu PDF z formátu ChemSketch nemusíte mít na svém počítači ani program Adobe Acrobat a dokonce ani Acrobat Reader. Pro vizualizaci souborů PDF jeden z nich však budete potřebovat. Adobe Acrobat Reader ve verzi, která je šířena zdarma je v instalačním podadresáři ACD/Labs. (Může být získán zdarma i na URL www.adobe.com.)

1. Zkontrolujte, že vše je na vaší presentaci vše tak jak má být (PDF soubory se již needitují).

Tip Použijte zobrazení celé presentace **Full Page** .

2. Klikněte na knoflík **Export to PDF** . Program se zeptá na jméno nového souboru *.pdf a jeho umístění.
3. Napište jméno, např. *Chapter8.pdf* a klikněte **OK**.
4. Po úplné konverzi otevřete pro kontrolu nový PDF soubor v programu Adobe Acrobat Reader.

Pozn. Některé objekty vložené s vazbou OLE (**Edit > Insert Object...**) nemusí být vždy řádně převedeny do PDF. V takovém případě budete informováni při průběhu konverze zvláštní zprávou.

9. Pracujeme se styly v módu struktur

9.1 V kapitole probereme

Pokud potřebujete tvořit struktury, které mají celou řadu atributů stejných, jako například řez písma a jeho velikost (font), sílu čar znázorňujících vazby aj., můžete uložit programu ChemSketch, aby si takové atributy pamatoval jako „styl“ (Style). Taková možnost je velmi užitečná, pokud potřebujete zobrazit molekuly jedním způsobem, když s nimi pracujete a druhým podle požadavků nějakého časopisu.

V této kapitole se naučíme:

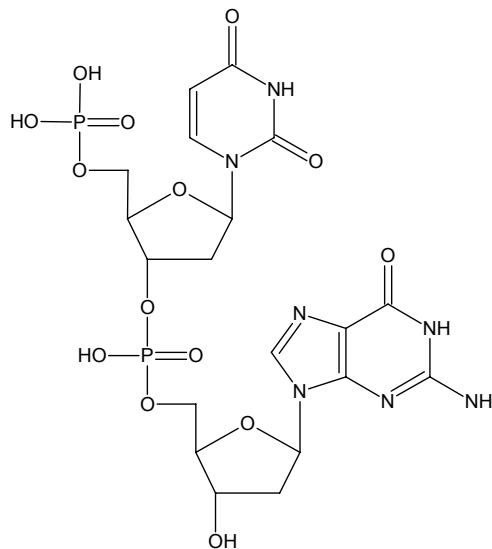
- měnit styl strukturních vzorců;
- zapsat takový styl;
- aplikovat existující styl; a
- vyznačit styl, který je předvolen „default“.

9.2 Změna stylu strukturních vzorců

Styl je soubor atributů pro zobrazení (atomu a vazby u dané strukturní reprezentace; tloušťky pera, velikosti a tvaru šipek, výplně, fontu, tvaru odstavce aj., pro objekty a text) pro který můžeme definovat název a který můžeme zapsat v elektronické podobě.


Za použití techniky popsané v kapitole 7 nakreslete následující vzorec reprezentující fragment molekuly DNA. Zapište jej jako *dnafrag.sk2*.

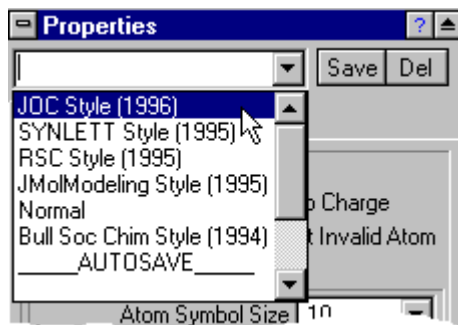
Tip Tato struktura může být snadno nakreslena pomocí šablony **DNA/RNA Kit** z okna šablon (Template Window). Použijte šablony 2-deoxyribose-5-phosphate, uracil a guanine. Když budete připojovat šablonu použijte klávesovou zkratku SHIFT + klik čímž dojde k připojení fragmentu bez vytvoření další vazby. Pro další informace o oknu šablon viz. kapitolu 7.5



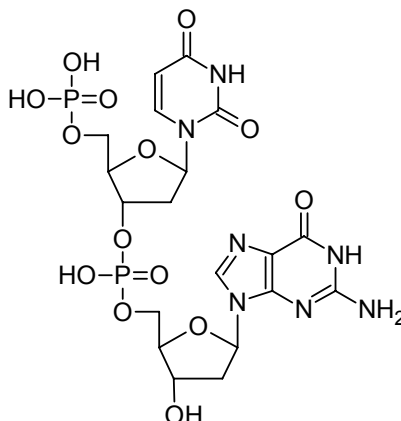
9.2.1 Použití stylu definovaného časopisem

Vezměme například, že píšete článek, který chcete zaslat do časopisu *Journal of Organic Chemistry*.

1. Zvolte nakreslenou molekulu dinukleotidu nástrojem **Select/Move** .
2. Umístěte kurzor nad jeden z markerů označené struktury tak, že se malý prázdný čtvereček změní na čtverec plný. Dvakrát klikněte a objeví se dialogové okno vlastností **Properties**.
3. Klikněte na malou šipku v rozbalovací nabídce a vyberte **JOC Style (1996)**:



4. Klikněte na knoflík aktivace **Apply** a nakreslená molekula se změní tak, jak to požaduje příslušná norma časopisu. Klikněte vedle molekuly a zrušte výběr:



5. Z nabídky **File** zvolte **Save As** a zapište změněnou strukturu jako soubor *dnafrag2.sk2*.
6. Opět zvolte celou molekulu a z nabídky **Style** zvolte dialog **Properties** ve kterém vyberte styl jménem **Normal**.
7. Klikněte na aktivaci **Apply** a molekula bude vypadat jako na začátku našeho cvičení.

9.2.2 Příprava obrázků pro publikaci



Kromě toho, že struktura musí způsobem nakreslení odpovídat požadavkům redakce, existuje celá řada dalších náležitostí, které musí rukopis splňovat. Z toho důvodu přiložila společnost Advanced Chemistry Development pokyny **Instructions for Authors** pro více než 80 časopisů v hyperlinkované podobě k programu ChemSketch.

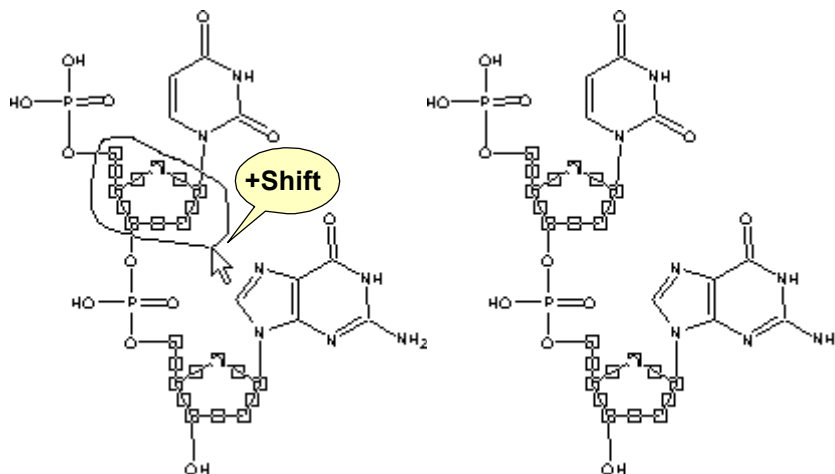
1. Pro příklad z nabídky **Help** zvolte **Instructions for Authors**.
2. Najděte **Journal of Organic Chemistry**.
3. Klikněte na hyperlink k souboru Adobe PDF a zobrazte jej.
4. Použijte knoflík **Contents** k návratu na seznam časopisů, jejichž pokyny si můžete takto zobrazit.

Pozn. Ne všechny časopisy mají striktní požadavky na nakreslené struktury, nemusíte je tudíž ani najít v seznamu stylů.

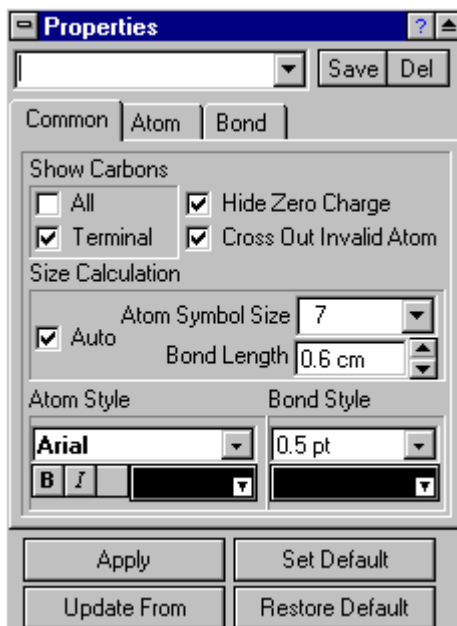
9.3 Tvorba vlastního stylu

Řekněme, že budeme chtít vytvořit presentaci, ve které bude jasně odlišena cukerná složka, fosfát a nukleobáze.

1. Otevřeme soubor *dnafrag.sk2* (anebo nakreslíme náš dinukleotid podle návodu v sekci 9.2) a potvrdíme si, že pracujeme v módu Structure.
2. Otevřeme nástroj výběru **Lasso On**  a zvolíme nástroj **Select/Move** .
3. Vybereme cukernou složku tak, že ji omotáme lasem (pokud držíme stisknutou klávesu SHIFT můžeme vybrat i dva oddělené fragmenty):

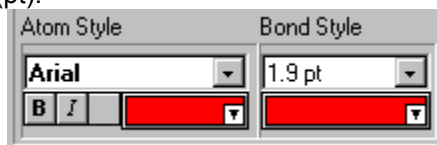


4. Cursor umístíme nad zvolený fragment tak, že jej označující marker změní formu z prázdného čtverce na plný. Dvojným kliknutím otevřeme panel **Properties**:



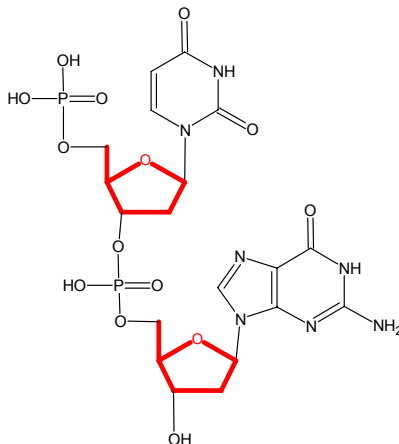
9.3.1 Uživatelský styl: Sugar

1. V sekci **Atom Style** a **Bond Style** klikněte na barvu a vyberte jinou, např. červenou. Sílu vazby nastavte na 1.9 bodů (pt).

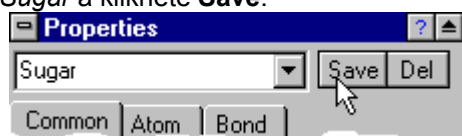


Pozn. Jednotky měř ve většině panelů ChemSketch odpovídají jednotkám zvoleným v dialogu **Preferences** (nabídka **Options**). Můžete zvolit pro hodnoty šířek a délek kteroukoliv jednotku z nabídky, tj. body (points)/palce (inches)/milimetry/centimetry. Vepište novou hodnotu a zvolte jednotky (pt/in/mm/cm), např. 5 pt. Hodnoty budou přepočítány podle zvolené jednotky.

2. Klikněte na **Apply**. Zvolené fragmenty budou mít červenou barvu:



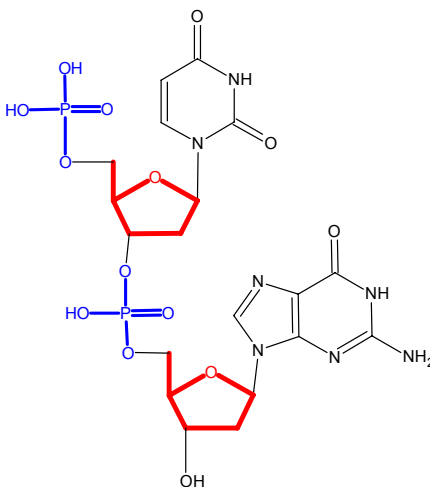
- Zvolenou metodu úpravy nyní zaznamenáme jako styl. V seznamu „Style list box“ dialogu **Properties**, napište *Sugar* a klikněte **Save**:



- Program se dotáže zda chcete tento uživatelský styl zapsat. Klikněte **Yes**.

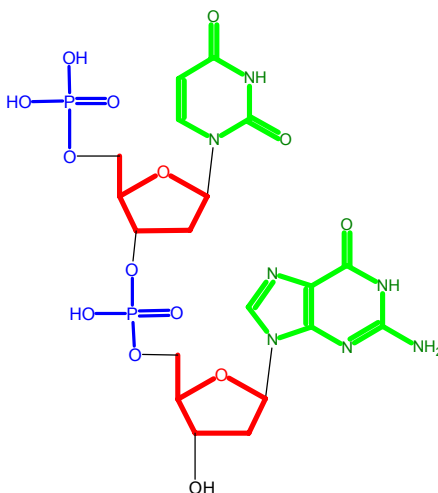
9.3.2 Uživatelský styl: Phosphate

- Stejným způsobem zvolte fosfátové části molekuly a definujte barvy jako modré.
- Zapište** tento styl jako *Phosphate* a pak klikněte na **Apply**:



9.3.3 Uživatelský styl: Base

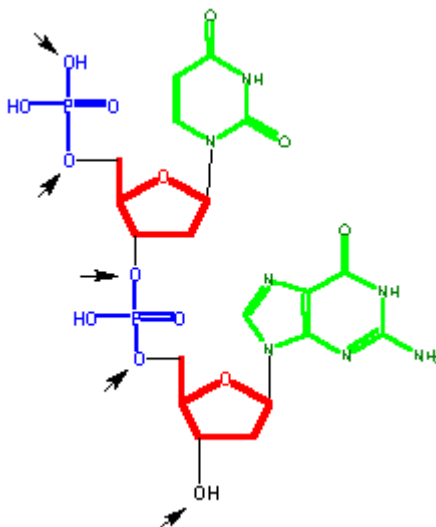
- U basí zvolte barvu písma tmavozelenou a u vazeb neonovou zeleň.
- Zapište** tento styl jako *Base* a pak klikněte **Apply**:



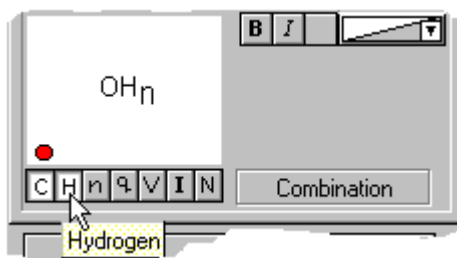
9.3.4 Uživatelský styl: Highlight

Může se stát, že budeme potřebovat zdůraznit některé kyslíkové atomy. Definujeme nový styl pro sdůraznění, *Highlight*.

1. Za použití metody SHIFT+ klik vybereme šipkou označené kyslíkové atomy:

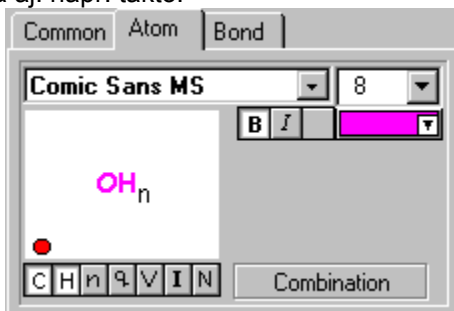


2. Dvakrát klikněte na jeden ze zvolených atomů a v panelu **Properties** zvolte záložku **Atom**.
3. Abychom změnili barvu a velikost obou atomů (O a H) zvolte pomocí SHIFT+klik odpovídající knoflíky v řádce pod panelem náhledu:



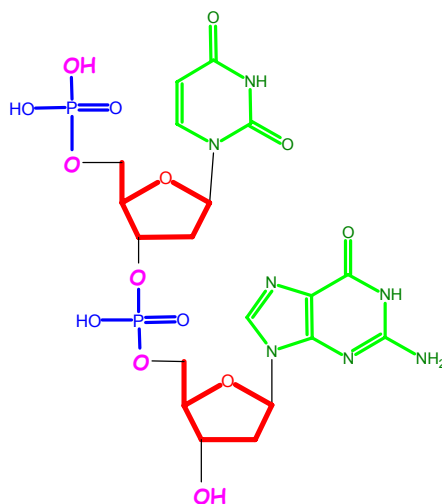
Pozn. Můžete změnit i jiné atributy (počet vodíků (n), náboj (q), mocenství (V), isotop (I), číslování (N)) zvolením příslušného tlačítka.

4. Změňte barvu, velikost písma aj. např. takto:



Pozn. Stejně můžete měnit i atributy vazeb.

5. Klikněte **Apply**:

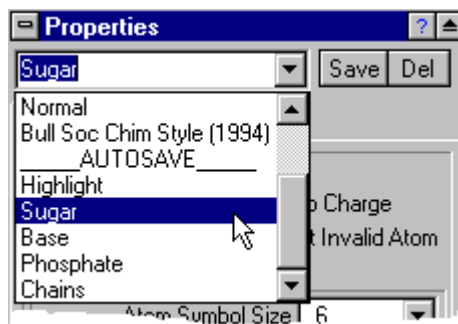


6. Zapište tento styl jako *Highlight*.

9.4 Použití existujících stylů

Procvičíme si nyní použití našich nových stylů na souboru *dnafrag2.sk2*.

1. Nástrojem **Lasso** obkroužíme cukerné podíly molekuly, jako v sekci 9.3.
2. Dvakrát klikněte na fragment
NEBO vyberte nástroj **Structure Properties** z nabídky **Tools**.
3. V panelu **Properties** v otevírací výběrové nabídce zvolíme *Sugar*.



4. Klikněte **Apply**. Zvolený styl bude aplikován na příslušný fragment.
5. Zvolte fosfáty a změňte je stylem *Phosphate*. Klikněte **Apply**.
6. Podobně zvolte báze a změňte je pomocí stylu *Base*. Klikněte **Apply**.

Pozn. Informace o uživatelských stylech bude uchována na počítači v podadresáři Windows či WinNT v souboru USERSTL.SK. Tento soubor můžete sdílet s kolegy k dosažení unifikovaných prezentací.

9.5 Zvolení předvoleného stylu

1. V panelu **Properties** zvolte styl, který upřednostňujete.
2. Klikněte na **Set Default** a zvolený styl bude aplikován na každou novou nakreslenou strukturu.

Pozn. Předvolený styl nemusí být zapisován jako zvláštní styl. Zvolte atributy, klikněte **Set Default**. Vaše atributy se stanou preferovanými.

10. Práce se styly v kreslícím módu

10.1 V této části se naučíme

V kreslícím módu Draw Mode může styl ovládat definice jednoho, nebo řady atributů: kreslení (pen), výplň (fill), šipka (arrow), písmo (font) a odstavec (paragraph). To umožňuje vytvoření různých stylů pro text, objekty vyplněné barvou, šipky a čáry.

V této kapitole se naučíme jak:

- změnit styl objektu;
- zapsat styl; a
- zvolit styl jako předvolený.

10.2 Změna stylu platného pro objekt

V kapitole 8, která popisuje jak kreslit DNA šroubovici a orbitaly byl již uveden stručný návod pro práci se stylem objektu. V této sekci se s ní seznámíme podrobněji.

1. Zvolte příslušný objekt (či objekty) u kterých chcete měnit styl.
2. Dvakrát klikněte na zvolené a zobrazí se panel **Objects**. Podle druhu zvoleného objektu (tvar, lineární objekt, šipka, text, spektrum, tabulka, strukturní vzorec) může panel obsahovat různé knoflíky:



3. Zvolte náležité parametry z panelu a klikněte **Apply**.

Pozn. Zvolené parametry ze sekce **Common** budou použity u všech objektů. Např., barva pera ovlivní tvary, čáry a struktury. Pokud změníme některý atribut např. pouze v Structures bude ovlivněno pouze kreslení struktur.

10.3 Zaznamenání stylu

1. Specifická nastavení zapíšeme kliknutím na **Save As new Style** v panelu **Objects**.
2. V dialogu **Save User Style** nastavíme atributy, které mají do nového stylu být zahrnuty. Například, pokud chcete zavést zvláštní styl pro text (např. obsahující česká písma) přesvědčte se, že jsou zatrženy volitelné funkce **Font Style** a **Paragraph Style**.
3. Napište název stylu a klikněte **OK**. Styl bude přidán k seznamu stylů a může být použit v panelu **Objects** či použit u vybraných objektů jako předvolený (default).

10.4 Použití existujícího stylu

Nyní použijeme jeden z nově vytvořených stylů (je již jedno zda byly dodány s programem, nebo vytvořeny uživatelsky) na zvolený objekt.

1. Zvolte objekt(y) na které chcete styl aplikovat.
2. Dvakrát klikněte na zvolený objekt a otevřete panel **Objects**.
3. Klikněte na **Load** a ze seznamu stylů zvolte ten, který se vám hodí. Atributy tohoto stylu budou dosazeny za předvolené hodnoty.
4. Klikněte **Apply**.

10.5 Volba předvoleného stylu

Předvolený (default) soubor nastavení může být specifikován v panelu stylů z nabídky **Tools**:

- **čára - Pen Style Panel**
- **výplň - Fill Style Panel**
- **šipka - Arrow Style Panel**
- **písmo - Font Panel**
- **odstavec - Paragraph Panel**

Nastavení v kterémkoliv z těchto panelů se stanou automaticky (po aktivaci) předvolenými (default) hodnotami.

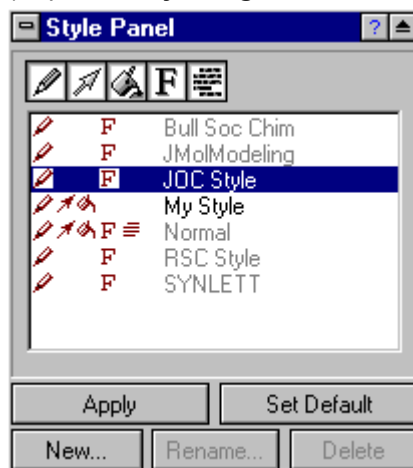
Můžete nyní zvolit existující styl do těchto panelů prostým kliknutím na **Load**. Styl je automaticky zvolen do panelů stylů a stává se předvoleným (default).

Můžete také nahrát atributy stylu nakresleného objektu do panelu stylů (Style Panel). Klikněte na **Update From** a potom na objekt. Atributy stylu daného objektu se nahrají do panelů stylu a jsou automaticky zařazeny jako předvolené (default).


Pozn. Pokud byste chtěli zaměnit styl určitého nakresleného objektu bez ovlivnění předvolených (default) nastavení, použijte panel **Objects** (viz sekce 12.2).

10.6 Práce se styly

Se styly, které byly nedefinovány, můžete snadno pracovat (uschovat [save], použít [apply], přejmenovat [rename], vymazat [delete] nebo použít jako předvolené [set as default]), použijete k tomu panel stylů (**Style Panel**) z panelu **Style Organizer Panel** z nabídky **Tools**:



V tomto panelu můžete udělat následující:

Požadovaný úkon	Klikněte na knoflík
Zobrazit styl obsahující určité atributy (čára [pen], šipka [arrows], výplň [fill], písmo [font], odstavec [paragraph]).	Klikněte na odpovídající knoflík nahoře na panelu. (Pro vaši pomoc se poté co nad knoflík umístíte kurzor objeví žlutý nápis s označením funkce.)
Zobrazit seznam stylů.	klikněte na knoflík(y) na horním okraji panelu tak, že budou zvoleny (stisknuty):  .
Použít styl u vybraného objektu(ů).	Vyberte styl (název se probarví) a klikněte Apply .
Nastavte styl jako předvolený.	Zvolte požadovaný styl ze seznamu a klikněte na knoflík Set Default .
Vytvořit nový styl na základě toho, který je předvolen.	Klikněte na knoflík New...
Přejmenování stylu.	Vyberte požadovaný styl v seznamu a klikněte na knoflík Rename... . Všimněte si, že tzv „zabudované“ styly (zobrazí se šedou barvou) nelze přejmenovat.
Vymazat styl.	Vyberte styl ze seznamu a klikněte na knoflík Delete... . Všimněte si, že tzv „zabudované“ styly (sobrazí se šedou barvou) nelze vymazat.

11. Výpočet makroskopických vlastností

11.1 V lekci probereme

ACD/ChemSketch je natolik univerzální editor chemických struktur, že může být představitelné, že fakt, zabudované možnosti výpočtu řady chemických a fyzikálně chemických parametrů může být snadno přehlédnut. Jde o následující možnosti predikce:

- molekulová hmota formula weight;
- procentické složení prvků percentage composition;
- molární refraktivita molar refractivity;
- molární objem molar volume;
- parachor parachor;
- index lomu index of refraction;
- povrchové napětí surface tension;
- hustota density;
- dielektrická konstanta dielectric constant;
- polarizabilita polarizability;
- monoisotopická, nominální a průměrná hmota monoisotopic, nominal and average mass.

V této kapitole jsou popsány jednoduché prostředky na výpočet (odhad) vyjmenovaných parametrů. Algoritmy pro tyto výpočty jsou stručně vysvětleny též. Přehled shody mezi vypočtenými a experimentálními hodnotami je srnut pro několik set sloučenin.

Všimněte si, prosím, že v této kapitole je slovo „vlastnosti“ (properties) použito ve významu fyzikálně chemickém, zatímco obecně používaný termín vlastnosti (properties) v software ChemSketch je spíše elektronickou charakterizací dokumentu či objektu. Tak např. v nabídce **Tools**, umožňuje **Structure Properties** nastavit velikost písem, sílu vazeb atd. Nicméně v téže nabídce **Tools** nalezneme povel pro výpočet vlastostí (fyzikálně chemických) **Calculate > All Properties**.

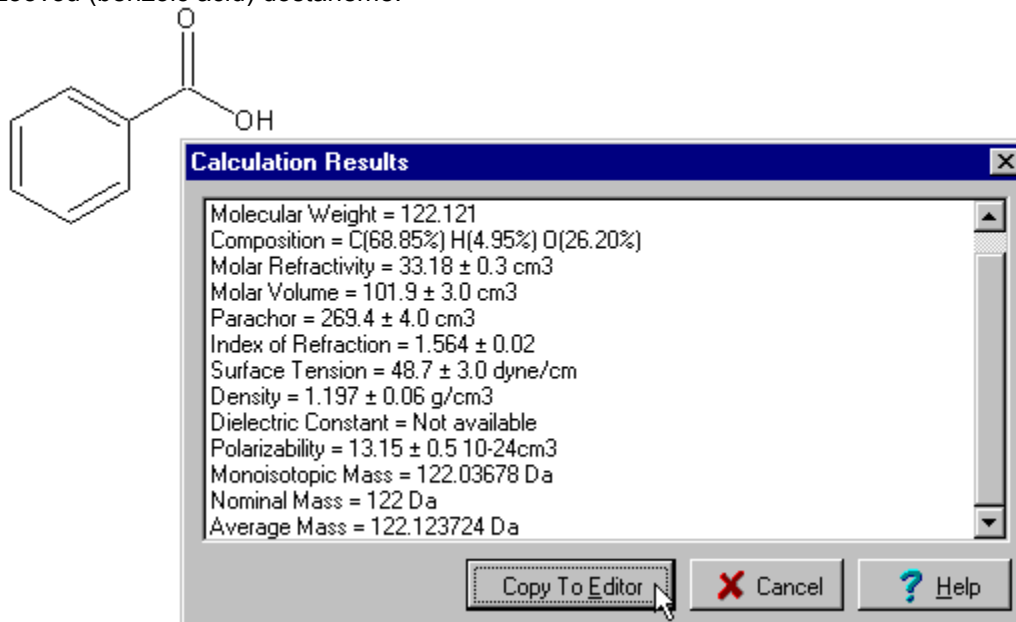
11.2 Výpočet makroskopických vlastností

11.2.1 Nabídka

K určení kterékoliv nebo všech uvedených hodnot molekulových vlastností:

1. V módu struktur nakreslete strukturální vzorec.
2. Z nabídky **Tools** vyberte **Calculate...** a pak buď všechny (**All Properties**) nebo vybranou vlastnost.

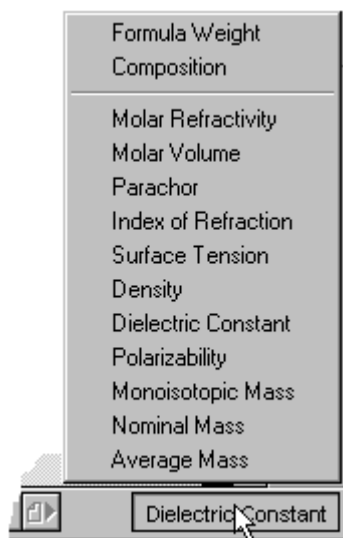
3. Po provedeném výběru je vypočtená vlastnost zobrazena v dialogovém okně výsledků (**Calculation Results**). Například volbou **Tools>Calculate...>All Properties** pro kyselinu benzoovou (benzoic acid) dostaneme:



4. Text z okna výsledků je zkopírován na pracovní plochu editoru ChemSketch po kliknutí na knoflík **Copy to Editor**.

11.2.2 Automatické zobrazení na stavové liště

Je možné zobrazit vybranou molekulární vlastnost přímo na stavové liště:



Pokud klikneme na box na pravé straně stavové lišty můžeme zvolit vlastnost, která bude nadále zobrazována místo předvolné molekulové hmotě. V zobrazeném případě pátráme po sloučenině s vhodnou dielektrickou konstantou ϵ^{20} , je tudíž výhodné ji zobrazovat pro každou nakreslenou strukturu.

11.3 Algoritmus výpočtu vlastností

Jádrem aditivně skládaného výpočtového algoritmu pro výpočet fyzikálně chemických vlastností v programu ChemSketch je předpoklad, že tyto vlastnosti mohou být vypočteny s dostatečnou přesností za použití aditivních atomových a fragmentálních inkrementů. Pomíjí se molekulovou hmotu (MW), jejíž výpočet je triviální, algoritmy mohou být rozděleny do tří skupin:

- základní makroskopické vlastnosti: molární objem [Molar Volume (MV)], molární refraktivita [Molar Refractivity (MR)] a parachor (P_r);
- vlastnosti odvozené: hustota [Density (d)], index lomu [Refractive Index (n)] a povrchové napětí [Surface Tension (γ)]; a
- dielektrická konstanta (permitivita) [Dielectric Constant ϵ (Permittivity)].

Základní vlastnosti, jako molární objem (MV), molární refraktivita (MR) a parachor (P_r) jsou vypočteny pro zadanou strukturu nejprve. Aditivní atomové inkrementy v tomto algoritmu závisejí na vazbách (jednoduché, dvojité, aromatické, *etc.*) samotného atomu a atomů sousedních. ChemSketch jako editor struktur snadno rozezná a určí druh atomu a vazby, *i.e.*, zda je např. součástí cyklu, aromatické struktury, alifatické, *etc.*

Predikční algoritmus pro hustotu (d), index lomu (n) a povrchové napětí (γ) jsou založeny na dobře známých fyzikálně chemických poučkách, které lze nalézt v řadě učebnic. Tyto poučky vyjadřují d , n a γ jako funkci MV, MR či P_r . Tudiž, pokud máme vypočteny MV, MR a P_r , pomocí aditivních funkcí je jednoduché dobrat se predikce d , n a γ užívaje zmíněných pouček.

Hodnoty aditivně skladebných atomových inkrementů pro MV, MR a P_r byly zjištěny pracovníky společnosti ACD z rozsáhlé experimentální databáze popisující vztah struktury k hustotě, indexu lomu a povrchovému napětí. Hodnoty MV, MR a P_r byly rekalkulovány z d , n a γ . Tyto parametry jsou vlastnictvím společnosti Advanced Chemistry Development.

Predikce dielektrické konstanty ϵ (permittivity) souvisí velmi úzce s predikcí teploty varu (Boiling Point), kterážto je svébytným produktem společnosti ACD nezahrnutým (jako cca 50 dalších method) do samostatného ChemSketch. Odborníci společnosti ACD objevili aditivní funkci, která popisuje souvislost hodnoty dielektrické konstanty a dalších vlastností sloučenin, které mohou být vypočteny aditivní metodou jako MV. Objev tohoto vztahu umožnil využití aditivně skládaného principu fragmentálních příspěvků z rozsáhlé databáze obsahující m.j. strukturální vzorce a experimentálně zjištěné dielektrické konstanty. Za použití uvedené funkce a vpočtem získaného MV pro danou strukturu může být předpovězena i dielektrická konstanta bez dalších obtíží.

11.3.1 Molární objem, MV

Podle definice

$$MV = \frac{MW}{d}.$$

vypočte ChemSketch molární objem z aditivních příspěvků. Aditivní atomové inkrementy jsou získány za použití databáze hustot a spočtených molekulových hmot (MW).

11.3.2 Molární refraktivita, MR

Tak zvaná Lorentzova-Lorenzova rovnice dává do souvislosti index lomu, hustotu a molekulovou hmotu:

$$MR = \frac{n^2 - 1}{n^2 + 2} \cdot \frac{MW}{d}$$

ChemSketch počítá molární refraktivitu z aditivních inkrementů. Aditivní atomové inkrementy byly získány z databází hustot, indexů lomu a vypočtených molekulových hmot (MW).

11.3.3 Parachor, P_r

Podle definice,

$$P_r = \left(\frac{MW}{d} \right) \gamma^{1/4}$$

vypočte ChemSketch parachor z aditivních inkrementů. Aditivní atomové inkrementy byly získány z databází hustot, povrchových napětí a molekulových hmot (MW).

11.3.4 Hustota, d

Podle definice

$$d = \frac{MW}{MV}$$

vypočte ChemSketch hustotu z molekulové hmoty a vypočteného molárního objemu (viz výše).

11.3.5 Index lomu, n

Podle Lorentzovy-Lorenzovy rovnice

$$n = \sqrt{\frac{2 \cdot MR + MV}{MV - MR}}$$

vypočte ChemSketch index lomu z molárního objemu a molární refraktivity, přičemž obě hodnoty jsou vypočteny jak uvedeno výše.

11.3.6 Povrchové napětí, γ

Podle definice,

$$\gamma = \left(\frac{P_r}{MV} \right)^4$$

vypočte ChemSketch povrchové napětí ze spočtené molekulové hmoty (MV, viz výše) a spočteného P_r (viz výše).

11.3.7 Dielektrická konstanta, ε (permitivita)

$$f(\varepsilon) = f(MV, \text{aditivní_funkce})$$

ChemSketch vypočte dielektrickou konstantu ze spočtené molekulové hmoty MV (viz výše) a empirické aditivní funkce, jejíž tvar je intelektuálním vlastnictvím fy ACD.

11.3.8 Polarizabilita

Tato vlastnost je vypočtena z hodnoty molární refraktivity (MR) (viz sekce 11.3.2) takto:

$$\text{Polarizabilita} = 0.3964308 \cdot MR$$

11.3.9 Monoisotopická, nominální a průměrná hmota

Monoisotopická hmota (M_{mi}) je přesná hmota nejrozšířenějšího přírodního izotopu daného prvku, případně molekulová hmota z takových hodnot spočtená.

Jmenovitá (nominální) hmota (M_n) je součet aproximovaných monoisotopických hmot prvků ze kterých je tvořena molekula.

Průměrná (střední) hmota (M_{av}) je vypočtená hmota částice založená na atomových hmotách prvků ze kterých je složena.

Pozn. překl.:

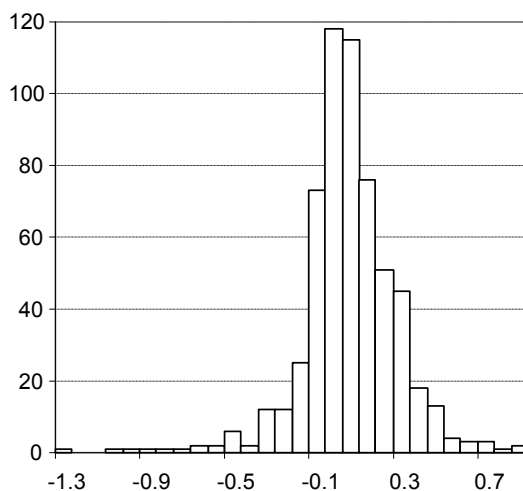
Tak například uhlík je běžně přítomen jako směs ^{12}C a ^{13}C izotopů v poměru 98,9 % ku 1,1 %. Podle definice byla uhlíku ^{12}C přiřčena atomová hmota 12,00000 a všechny ostatní izotopy mají relativní hmotu od této odvozenou ^{13}C má pak hmotu 13,00335. Pro ^1H je 1,00783 a ^{16}O je 15,99491. Běžně užívaný termín 'relativní molekulová hmota' molekuly používá průměrné hodnoty hmot atomů zahrnující atomové hmoty všech přítomných izotopů dohromady v rámci jejich výskytu tak, jak jsou definovány periodicky IUPAC. Taková hmota je pak průměrná molekulová hmota. Dospíváme pak k termínům jako jmenovitá (nominální) monoisotopická hmota a přesná izotopická hmota.

název	sumární vzorec	jmenovitá	přesná	střední hmota
<i>methylstearát</i>	$\text{C}_{19}\text{H}_{38}\text{O}_2$	298	298,2872	298,5114
<i>ubichitin</i>	$\text{C}_{378}\text{H}_{630}\text{N}_{105}\text{O}_{118}\text{S}$	8556	8560,6254	8565,873

V tabulce vidíme účinek „množství“ atomů na malou a velkou molekulu

11.4 Korelace (statistická) experimentálních dat

11.4.1 Distribuce predikční chyby molární refraktivity



Vertikální osa:

počet sloučenin

Horizontální osa:

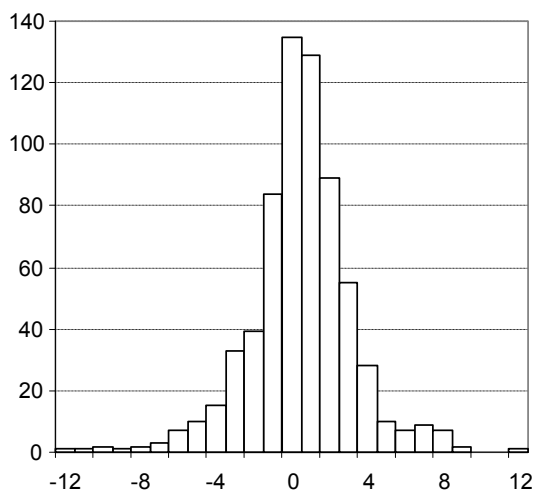
chyba odhadu molární refraktivity metodou ACD

Počet testovaných struktur:

592

$$MR_{exp} = 0.99901(\pm 0.00067) MR_{calc} + 0.026(\pm 0.025) \quad R=0.999867, \text{ StD}=0.23$$

11.4.2 Distribuce chyb predikce molárního objemu



Vertikální osa:

počet sloučenin

Horizontální osa:

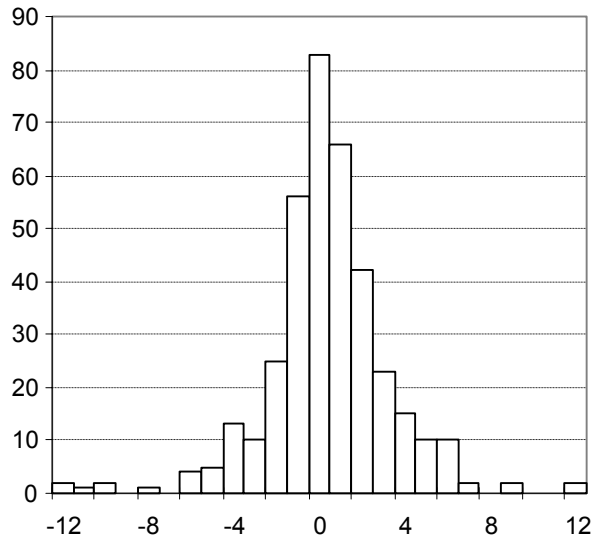
chyba predikce molárního objemu (ACD)

Počet testovaných struktur:

671

$$MV_{exp} = 0.9989(\pm 0.0020) MV_{calc} + 0.18(\pm 0.29) \quad R=0.998626, \text{ StD}=2.74$$

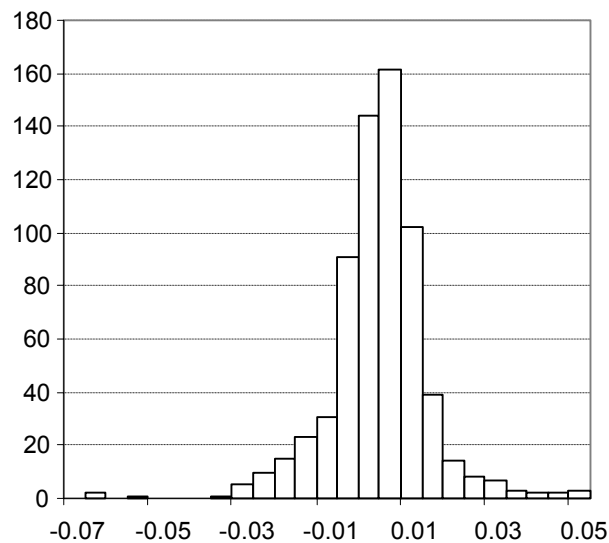
11.4.3 Distribuce chyby predikce parachoru



Vertikální osa: počet sloučenin
 Horizontální osa: chyba predikce parachoru metodou ACD
 Počet testovaných struktur: 377

$$Pr_{exp} = 0.9978(\pm 0.0015) Pr_{calc} + 0.68(\pm 0.46) \quad R=0.99958, \text{ StD}=3.11$$

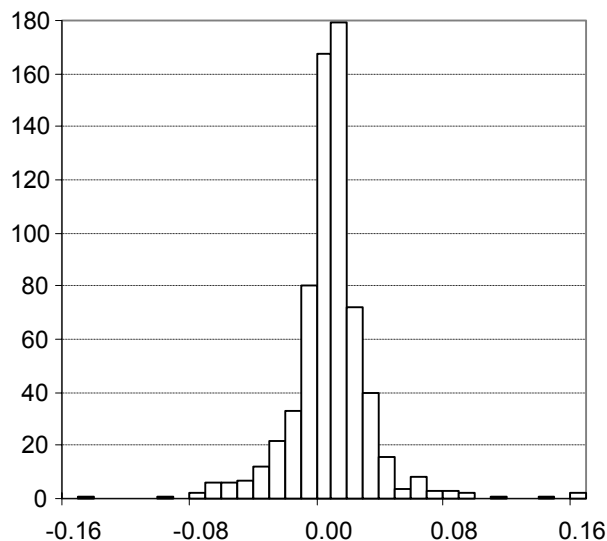
11.4.4 Distribuce predikční chyby indexu lomu



Vertikální osa: počet sloučenin
 Horizontální osa: chyba predikce indexu lomu metodou ACD
 Počet testovaných struktur: 665

$$n_{exp}^{20} = 0.98035(\pm 0.0073) n_{calc}^{20} + 0.028(\pm 0.011) \quad R=0.982, \text{ StD}=0.012$$

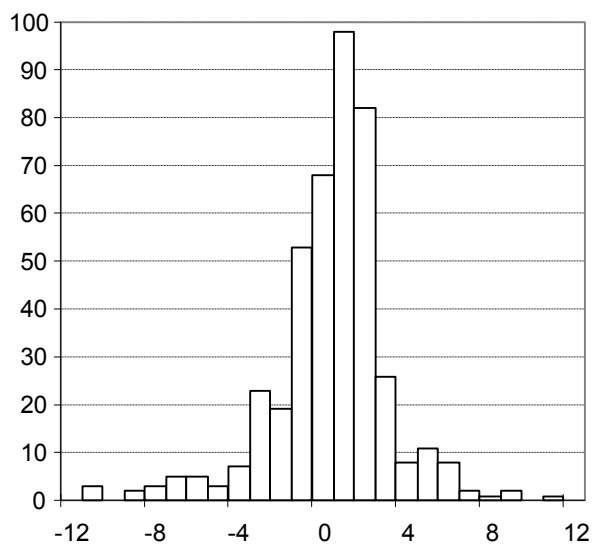
11.4.5 Distribuce predikční chyby pro hustotu



Vertikální osa: počet sloučenin
 Horizontální osa: chyba predikce pro hustotu metodou ACD
 Počet testovaných struktur: 671

$$d^{20}_{exp} = 0.9947(\pm 0.0036) d^{20}_{calc} + 0.0052(\pm 0.0036) \quad R=0.995683, \text{ StD}=0.028$$

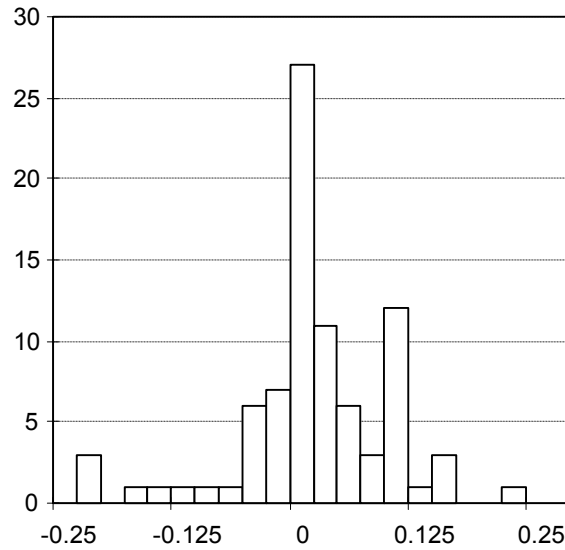
11.4.6 Distribuce predikční chyby pro povrchové napětí



Vertikální osa: počet sloučenin
 Horizontální osa: chyba predikce povrchového napětí (ACD)
 Počet testovaných struktur: 432

$$st^{20}_{exp} = 0.998(\pm 0.018) st^{20}_{calc} + 0.08(\pm 0.53) \quad R=0.934720, \text{ StD}=2.84$$

11.4.7 Distribuce chyby predikce dielektrické konstanty (permitivity)



Vertikální osa:

počet sloučenin

Horizontální osa:

chyba predikce dielektrické konstanty (ACD)

Počet testovaných struktur:

85

Pozn.: použito pouze pro uhlovodíky

$$\epsilon_{\text{exp}} = 1.005(0.033)\epsilon_{\text{exp}} - 0.013(0.072)$$

$$R=0.9588, \text{StD}=0.079$$


12. Klávesy speciálních funkcí

12.1 V lekci se naučíme

Okno pracovní plochy ChemSketch je velmi versatile vstupní editor molekulárních struktur. Snadno je to vidět na faktu, že celá řada softwarových produktů je nyní přístupná z ChemSketch „na stisknutí knoflíku“. Tato kapitola popisuje dva takové moduly, které mohou být obsluhovány z prostředí ChemSketch. ACD/Tautomers je nyní začleněn do ACD/ChemSketch a to jak v komerční tak freeware verzi; encyklopedie ACD/Dictionary je dostupná pouze v ACD/ChemSketch v komerční verzi.

12.2 Tautomery

Pro některé sloučeniny je charakteristická možnost jejich výskytu jako směsi dvou nebo více strukturálně rozdílných forem, které existují v roztocích ve vzájemné rovnováze. Ve většině případů jsou tautomerní formy produktem přesunu vodíku. Modul ACD/Tautomers je designován aby generoval nejdůležitější tautomerní formy nakreslené organické molekuly. Je dostupný na

povel **Check Tautomeric Form** z nabídky **Tools** anebo jako tlačítko .

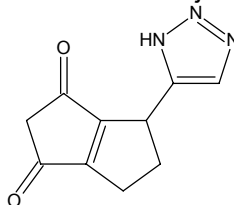
Možnost existence alternativních tautomerních forem by měla být vždy řádně uvážena, zejména pokud organická struktura obsahuje dvě nebo více dvojných či trojných vazeb konjugovaných s, nebo připojených k atomu kyslíku, dusíku, síry či jiným heteroatomům. Modul ACD/Tautomers poskytuje zabudovaným algoritmem pouze teoretické tautomerní formy, ne nutno si uvědomit, že ne všechny jsou nutně ty, které se ve skutečnosti uplatní, některé navržené tautomerní struktury tudíž nemyslí být ani správné. Je více než doporučeno nepoužívat tento nástroj jako jediný před rozhodnutím o možných tautomerech.

Modul ACD/Tautomers **nepracuje** v následujících případech chemických struktur:

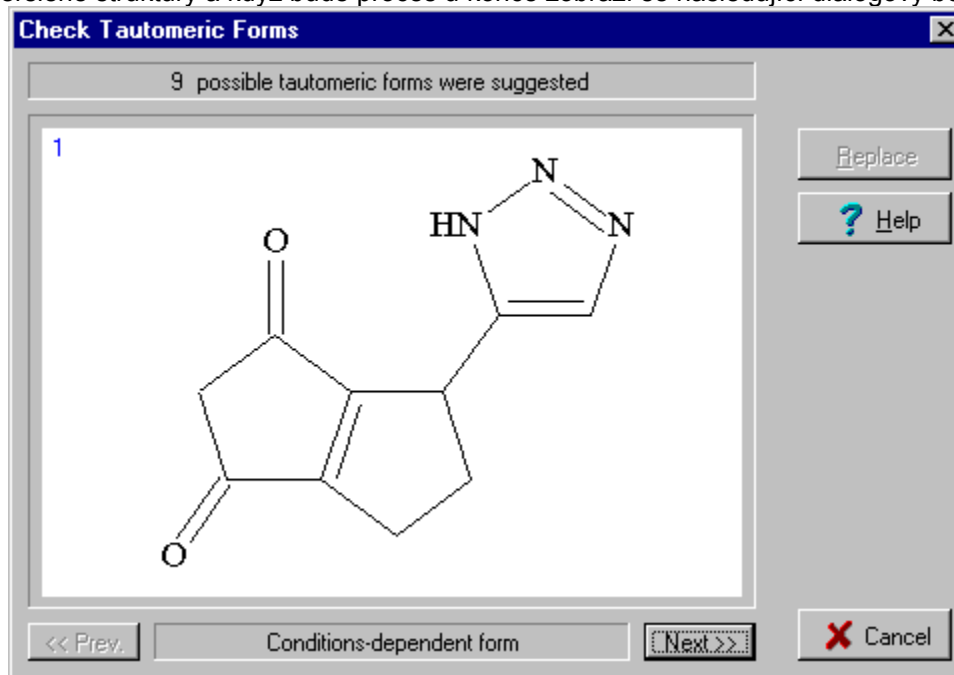
- struktura obsahuje atom(y) kovu;
- struktura obsahuje nabité atomy, jiné než neiontové deriváty IV-valentního dusíku (+) vázaného na kyslík (-);
- struktura obsahuje prvek v netypickém valenčním stavu;
- struktura s koordinačními vazbami; a
- struktura obsahující více než 255 atomů.

Vyzkoušíme si modul na ilustrativním příkladě:

1. Používaje výše popsané techniky nakreslíme následující strukturu:



2. Vyberte strukturu (použitím nástroje **Select/Move** ) , klikněte na knoflík **Check Tautomeric Forms**  na horní liště nástrojů. Program začne generovat a kontrolovat tautomerní formy nakreslené struktury a když bude proces u konce zobrazí se následující dialogový box:

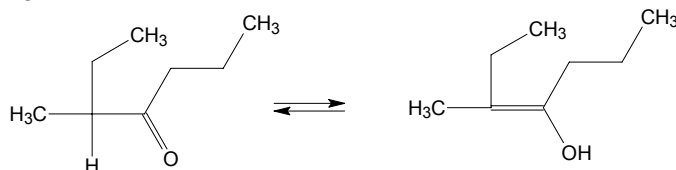


3. Odvozené struktury si můžeme prohlédnout, klikáním na tlačítka **Next >>** či **<< Prev.** .
4. Pokud nalezneme tautomerní formu, která lépe vystihuje v daných podmínkách nakreslenou strukturu můžeme ji nahradit kliknutím na tlačítko **Replace**.

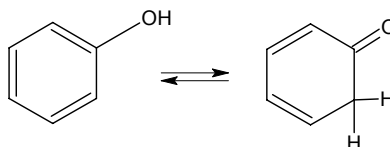
12.2.1 Příklady

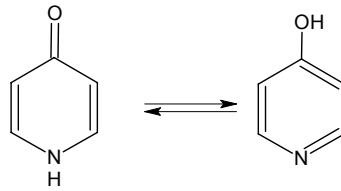
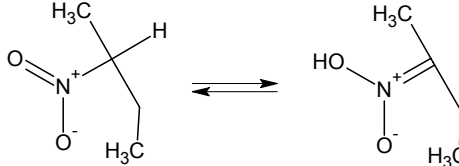
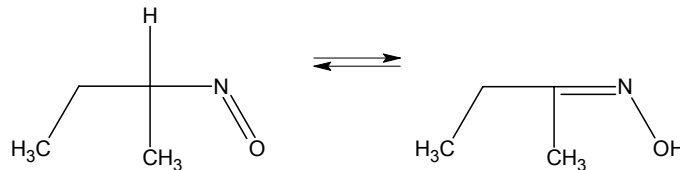
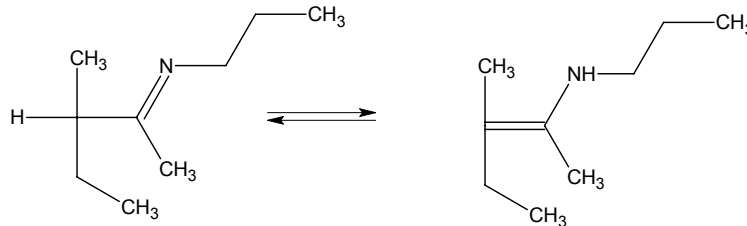
Uvedme si několik „klasických“ typů tautomerie, které můžeme výše popsaným způsobem prověřit stisknutím tlačítka Tautomers button v okně ChemSketch.

Keto-enol tautomerie



Fenol-keto tautomerie

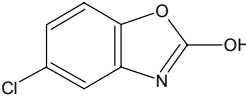
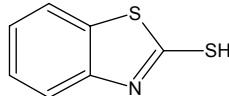
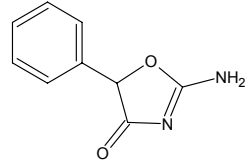
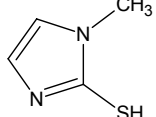
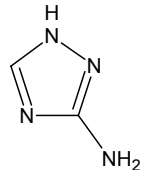
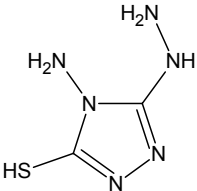
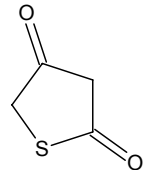
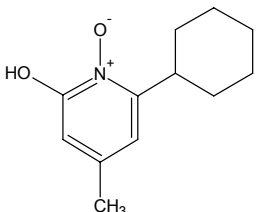
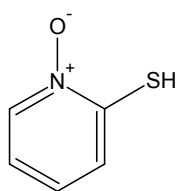
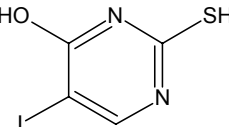
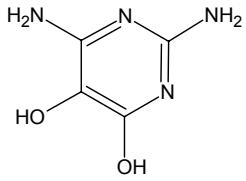
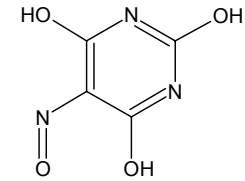
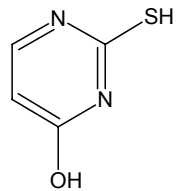
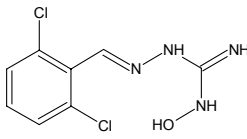
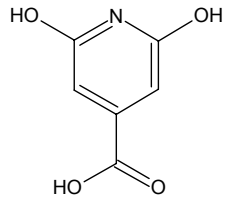
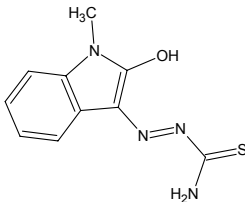
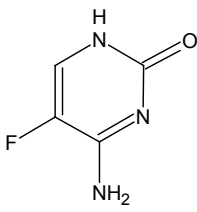
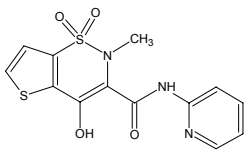
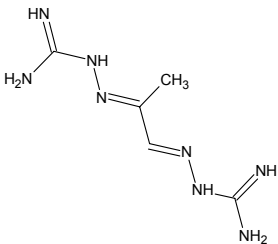
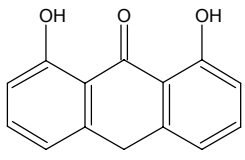


Tautomerie heterocyckického kruhu**Nitro-aci (aci-nitro) tautomerie****Nitroso-oxim tautomerie****Tautomerie imin-enamin****12.2.2 Chyby v chemické literatuře**

Stojí za poznámku fakt, že chemické struktury jsou často (tradičně) kresleny nesprávně a jejich tautomerní formy jsou ignorovány.

Všechny struktury v následující tabulce jsou překresleny z velmi uznávaných publikací. Mnoho z nich obsahuje chyby anebo jsou jejich tautomerní formy uvedeny chybně, bez ohledu na experimentální podmínky, za kterých jsou popisovány. S modulem ACD/Tautomers nadále není nutné riskovat přehlédnutí některého tautomeru u sloučeniny, jejíž vlastnosti se snažíme interpretovat pomocí predikčních programů ACD (jako např. pKa) či plánujete publikovat.

Sporné struktury z různých publikací			
<p>Thioguanin (antineoplastikum) 4 možné formy</p>	<p>6-Merkaptopurin (antineoplastikum) 5 možných forem</p>	<p>Allopurinol (antiurolithikum) 5 možných forem</p>	<p>Leukopterin 3 možné formy</p>

Sporné struktury z různých publikací			
 <p>Chlorzoxazon (relaxans skeletálního svalstva) 2 možné formy</p>	 <p>2-Mercaptobenzothiazol 2 možné formy</p>	 <p>Pemolin (CNS stimulant) 2 možné formy</p>	 <p>Methimazol (antihyperthyroid) 2 možné formy</p>
 <p>Amitrol (herbicid) 3 možné formy</p>	 <p>Purpald 2 možné formy</p>	 <p>Thiotetronová kyselina 3 možné formy</p>	 <p>Ciclopirox (antifungální) 2 možné formy</p>
 <p>Pyrithion (antibakteriální) 2 možné formy</p>	 <p>Iodthiouracil (thyroidní inhibitor) 2 možné formy</p>	 <p>Divicin 3 možné formy</p>	 <p>Violurová kyselina (chelatační činidlo) 2 možné formy</p>
 <p>2-Thiouracil (thyroidní inhibitor) 2 možné formy</p>	 <p>Guanoxabenz (antihypertensivum) 3 možné formy</p>	 <p>Citrazinová kyselina 2 možné formy</p>	 <p>Methisazon (antivirální) 2 možné formy</p>
 <p>Flucytosin (antifungální) 2 možné formy</p>	 <p>Tenoxicam (protizánětlivá, analgetická) 2 možné formy</p>	 <p>Mitoguazon (antineoplastikum) 4 možné formy</p>	 <p>Anthralin (antipsoriaticum) 2 možné formy</p>


12.3 Encyklopedie

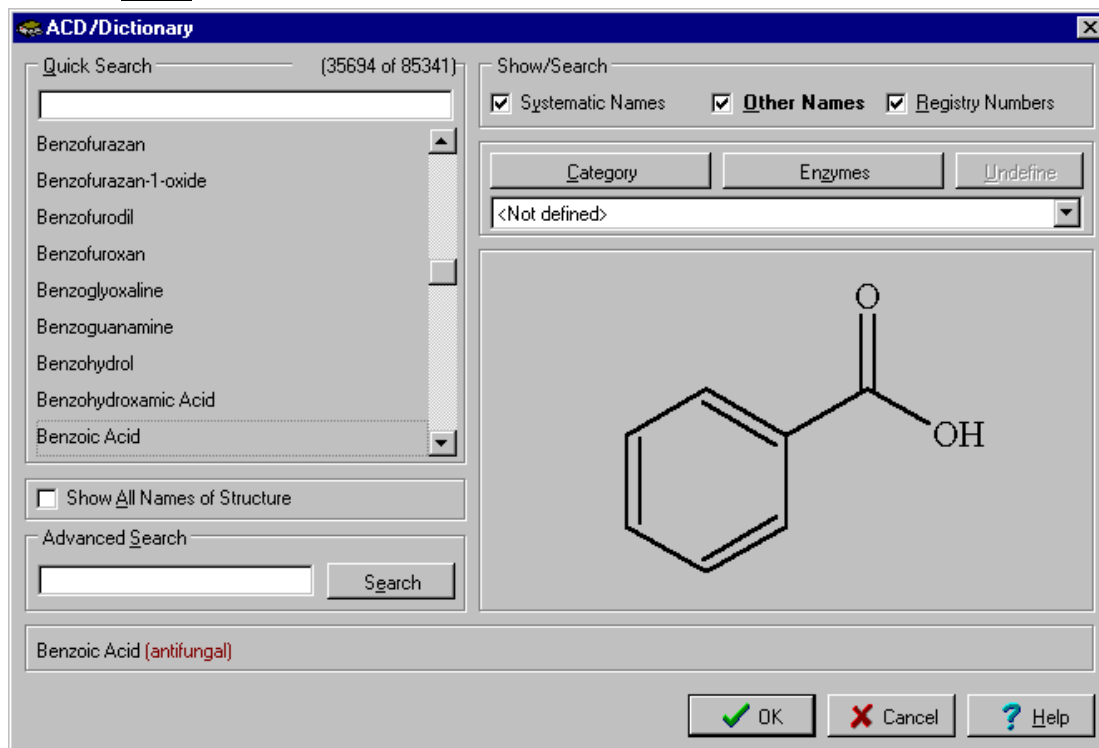
Encyklopedie „ACD/Dictionary“ je „add-in“ modul, který je nyní zabudován do všech komerčních kopií ACD/ChemSketch v. 5.0. Zdá se, že jedna z nejdůležitějších funkcí encyklopedie je možnost najít látku na základě jejího triviálního či firemního názvu (vč. acylpyrin SPOFA, pozn. překl.).


ACD/Dictionary nalézá chemické struktury na základě jejího chemického názvu. Obsahuje přes 85.000 systematických a nesystematických názvů a k nim příslušných chemických struktur.

Encyklopedie je prohledávatelná jak na základě úplného názvu tak jeho fragmentu. Z platformy ChemSketch prohledává i na základě strukturního vzorce.

Přestože mnoho vlastností encyklopedie ACD/Dictionary je pojednáno v návodu *ACD/Dictionary User's Guide*, zmíníme se o nich stručně i zde.

Na pravé straně pracovní plochy ChemSketch na liště **References**, klikněte na knoflík **Dictionary** . Objeví se dialogový box **ACD/Dictionary**:



Pozn. Pokud jste zakoupili licenci ACD/ChemSketch ale nevidíte knoflík **Dictionary**  v okně ChemSketch v módu Structure, ověřte si, prosím, zda jste správně při instalaci uvedli OBĚ registrační čísla při instalaci—jedno pro ACD/ChemSketch, a druhé pro ACD/Dictionary add-in.

Pro další informace prostudujte podrobně příručku *ACD/Dictionary User's Guide*!

12.4 ACD/Name Freeware Add-on—**Novinka verze 5.0!**

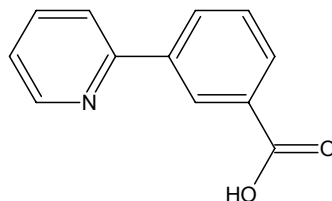
Ve verzi 5.0 je nyní možno použít modul ACD/Name Freeware add-on přímo z rozhraní ChemSketch. Tato zvláštní funkce je přístupná pomocí konflíku na horní základní liště:




Tento nástroj se používá snadno: nakreslete strukturu(y) k pojmenování, klikněte na tento knoflík a název struktury či směsi je vložen jako textové pole na pracovní plochu.

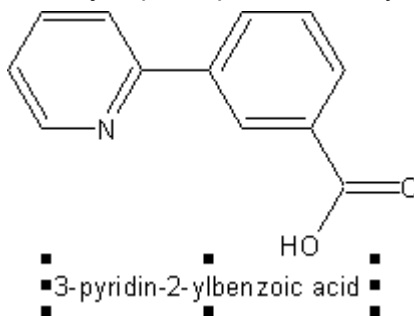
Vyzkoušejme si to na několika příkladech.

1. Pomocí ChemSketch nakreslete následující strukturní vzorec:



2. Pokud je na pracovní ploše více strukturních vzorců, tento vyberte.

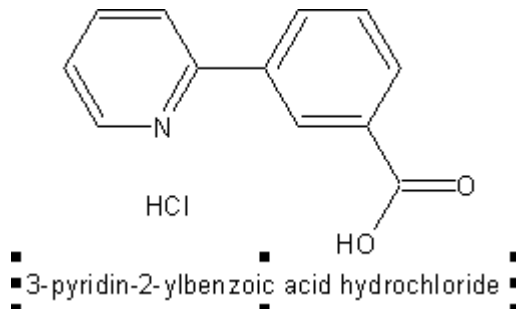
3. Klikněte na knoflík **Generate Name from Structure**  či z nabídky **Tools** vyberte **Generate Name from Structure**. Název se objeví přímo pod nakresleným strukturním vzorcem:



4. Posuňte název lehce dolů tažením myši.

5. Stiskněte knoflík atomu chloru  a klikněte jednou vedle struktury, nakreslí se HCl.

6. Zvolte obě struktury a klikněte znovu na knoflík **Generate Name from Structure**. Tentokrát se pod strukturu napíše název pro danou směs:



12.4.1 Omezení volné verze (freeware) ACD/Name

ACD/Name ve verzi freeware má následující omezení:

- Struktury, které mají být pojmenovány mohou obsahovat maximálně 50 atomů, včetně vodíků.
- Struktury mohou obsahovat pouze tyto prvky H,C,N,P,O,S,F,Cl,Br,I,Li,Na,K v jejich běžných mocenstvích.
- Struktury mohou obsahovat maximálně 3 cykly.
- ACD/Name ve verzi freeware neumožňuje měnit nastavení názvoslovných preferencí. Program používá preference, které odpovídají nejvíce preferovaným názvoslovným principům IUPAC.

Pozn. Pokud chcete získat informace o plné (neomezené) verzi ACD/Name software, podívejte se na http://www.acdlabs.com/products/name_lab/iupac/.
(V době vydání překladu bylo plnou verzi zahrnující principy IUPAC i CAS možno získat velmi výhodně jako akadeickou licenci v tzv. EduPack, pozn. překl.)

13. Dobrůtky - Goodies

13.1 Co jsou to „Goodies“?

Co jsou to "goodies"? Goodies se projeví jako řada dalších speciálních funkčních knoflíků mezi funkcemi ChemSketch. V podstatě jsou to implementované podprogramy v jazyce ACD/ChemBasic přidružené k těmto více než 20 novým knoflíkům ChemSketch.

ACD/ChemBasic je specializovaný programovací jazyk, který umožňuje přizpůsobit programy ACD software potřebám uživatele. Domníváme se, že je to také způsob, jakým můžeme ukázat jak je tento nástroj užitečný a jak lze ChemSketch ještě lépe využívat!

Všimněte si, že k použití Goodies nemusíte rozumět ani trochu programování v ACD/ChemBasic (nicméně, pokud o to zatoužíte, můžete se to otevřených kódů Goodies ponořit a naučit se jej).

13.2 Kde se získají?

Tyto užitečné pomůcky se nacházely již ve většině instalací verze ChemSketch 4.5. Přesvědčte se, zda soubory *.BAS jsou ve vašich ChemSketch podadresářích (např. C:\ACD50\EXAMPLES\CHEMBAS\GOODIES). Pokud je nenajdete, můžete je downloadovat z Web site ACD zdarma URL

http://www.acdlabs.com/products/chem_dsn_lab/goodies.html



Goodies se velmi snadno instalují, návod je na Webové straně. Snadno pak můžete využívat tyto nové funkce ChemSketch.







Všimněte si, že tyto nové knoflíky můžete z lišty ChemSketch kdykoli snadno vyjmout.









Pozn. Knoflíky ChemBasic Goodies jsou k dispozici pouze v módu **Structure**.







13.3 Goodies

Následuje seznam knoflíků a funkcí Goodies, které jsou k dispozici v době vydání příručky:

Knoflík	Funkce	Použití
Insert Page vložení 	Vloží prázdné strany na libovolné místo vašeho dokumentu ChemSketch. Všimněte si, že běžný způsob z nabídky Pages/New přidává stránky na konec dokumentu.	<ul style="list-style-type: none">Jděte na stranu, před kterou chcete vložit novou prázdnou stránku a klikněte na knoflík Insert Page.
Clone Page klonování 	Klonuje stranu se kterou pracujeme (spolu s jejím obsahem) s danou četností—jde o velmi užitečný nástroj pro tvorbu dokumentů s podobnými tabulkami, titulky, etc. Nové strany jsou připojovány na konec dokumentu.	<ol style="list-style-type: none">Zvolte stranu, kterou chcete klonovat.Klikněte na knoflík Clone Page.V otevřeném dialogovém okně, kteréb se objeví, určete počet klonů a klikněte OK.

Knoflík	Funkce	Použití
Move/ Copy Page přesun a kopie 	Přemístí a kopíruje strany— <i>i.e.</i> mění pořadí stran ve vašem dokumentu.	<ol style="list-style-type: none"> 1. Zvolte stranu ke kopírování. 2. Klikněte na knoflík Move/Copy Page. 3. V dialogovém boxu vepište počet stran po kterém chcete aby se zvolená strana objevila a klikněte OK. 4. Zvolte Yes v boxu zpráv pokud chcete stranu kopírovat a No pokud ji chcete jen přemístit. Klikněte Cancel a zastavte vykonání příkazu.
Delete Pages mazání 	Maze určené strany.	<ol style="list-style-type: none"> 1. Klikněte na knoflík Delete Pages. 2. V dialogovém boxu, který je zobrazen určete rozah stran k vymazání. 3. Budete upozorněni na nevratnost operace (disabling Undo). Zvolte OK pokud strany chcete opravdu vymazat. Klikněte Cancel ke zrušení povelu.
Annotate Document anotace 	Připojí k anotaci k dokumentu odvozenou od obsahu textového pole vlevo nahoře na každé straně. Tato funkce usnadňuje práci s velkými dokumenty a prezentacemi.	<ol style="list-style-type: none"> 1. Otevřete či vytvořte dokument. 2. Klikněte na knoflík Annotate Document. 3. Po provedení povelu klikněte na počítač stran ze spodní stavové lišty k zobrazení názvů stran.
Sketch-to-VRML Converter 	Exportuje všechny struktury molekul z aktivní strany do souboru typu VRML 2.0, který může být čten přes Cosmo, GLView, či jiný VRML browser.	<ol style="list-style-type: none"> 1. Nakreslete strukturu, kterou budete chtít exportovat na jednu stranu. 2. Klikněte na knoflík Sketch-To-VRML Converter. 3. Zvolte OK ve zprávě Ready to export... (nebo Cancel). 4. Napište název souboru a cestu a klikněte OK. Pamatujte, že pokud napíšete jenom název WRL souboru, program jej umístí do stejného adresáře jako sk2vrml.bas. 5. Specifikujte požadovanou strukturu prezentaci vepsáním příslušného písmena do dialogového boxu a klikněte OK.
SDF-to-Sketch Converter 	Importuje data (molekuly, text, etc.) ze souboru formátu MDL SDF do formátu ChemSketch dokumentu. Každý záznam souboru SDF bude pak samostatnou stranou. OMEZENÍ: pouze 100 záznamů může být takto importováno (ChemSketch dokument může obsahovat max. 100 stran). Pokud soubor SDF obsahuje více než 100 záznamů program zobrazí hlášení o částečn0 SDF konverzi (a počtu úspěšně importovaných záznamů).	<ol style="list-style-type: none"> 1. Klikněte na knoflík SDF-To-Sketch Converter. 2. V dialogovém boxu napište cestu a název souboru SDF který chcete importovat (vč. zobecňujících „*“ a „?“ a klikněte OK. Pokud napíšete pouze název souboru, bude váš SDF soubor program hledat v adresáři, ve kterém je program ChemBasic. Tudiže, pokud SDF soubor umístíte do téhož adresáře jako je sdf2sk.bas můžete psát jen název bez cesty. Pokud soubor SDF umístíte do podadresáře ChemBasic programu musíte napsat pouze tento podadresář. 3. Pokud výsledek hledání najde více souborů, nabídne vám volbu. Budete též dotázáni na název pole, který má být zobrazen s molekulou. Zvolte pole a klikněte OK.
Document Browser prohlížeč 	Prohledá adresáře a najde určené dokumenty ChemSketch a prohledá dokumenty ChemSketch, zda obsahují zadaný řetězec aniž je otevře.	Klikněte na tento knoflíka sledujte zobrazené instrukce. Jde o velmi užitečný nástroj.

Knoflík	Funkce	Použití
Table Wizard 	Vytváří tabulky a/nebo rovná objekty podle určeného počtu sloupců a řádek.	K vytvoření tabulky a umístění objektů do ní: 1. Klikněte na knoflík Table Wizard . 2. Budete informováni o počtu objektů na straně a návrhu na jejich zarovnání. Zvolte Yes . 3. Zvolte počet sloupců a řádků v tabulce. 4. Zvolte zda má mít tabulka okraje. Prázdnou tabulku vytvoříme: <ul style="list-style-type: none"> Pomocí Table Wizard na prázdné straně. Nebo <ul style="list-style-type: none"> Volbou No ve zprávě o zarovnání objektů.
Replace Element 	Nahradí jeden druh atomů jiným (příklad – perfluoroderiváty).	Pamatujte si, že tento program funguje pouze je-li nakreslena na stránce jen jedna struktura. 1. Nakreslete strukturu a klikněte na knoflík. 2. Zvolte prvek, který má být nahrazen a klikněte OK . 3. Zvolte nový prvek a klikněte OK .
Solution Calculator 	Vypočte váhu sloučeniny nutnou pro přípravu o daném objemu a molární koncentraci.	Pamatujte si, že tento program funguje pouze je-li nakreslena na stránce jen jedna struktura. 1. Nakreslete strukturu a klikněte na knoflík. 2. Zvolte požadovanou molární koncentraci a objem roztoku. 3. Výsledek je zobrazen.
Label Printer 	Vytvoří štítky a tiskne je na Avery Standard (45 šablon štítků) nebo na uživatelské listy.	1. Nakreslete struktury, které chcete mít na štítcích a klikněte na knoflík Label Printer . 2. Můžete také zhotovit štítky ze souboru SDF pokud bude v ChemSketch prázdná aktivní strana. 3. Další informace viz. soubor lprinter.txt v adrsáři Goodies.
Peptide Builder 	Vytvoří 3D peptidovou strukturu ze sekvence aminokyselin.	<ul style="list-style-type: none"> Další informace v souboru <i>pepbuid.sk2</i> v adresáři Goodies.
Carbohydrate Builder 	Vytvoří strukturu oligosacharidu ze zkratkovitého zápisu.	<ul style="list-style-type: none"> Další informace v souboru <i>sugarsk.txt</i> v adrsáři Goodies.
Reorder Pages 	Umožňuje cut-and-paste a copy-and-paste sekvence stran do nové pozice v rámci dokumentu.	1. Otevřete dokument, jehož strany chcete přeorganizovat. 2. Klikněte na tento knoflík a sleduje instrukce.
Rename Pages 	Mění názvy stran.	1. Otevřete dokument. 2. Klikněte na knoflík. 3. Napište číslo strany, kterou chcete přejmenovat a klikněte OK . 4. Napište jména a klikněte OK . 5. Názvy stran se zobrazí, pokud kliknete na knoflík "Page 1/1" dole v okně ChemSketch.

Knoflík	Funkce	Použití
Insert Page Numbers/ Annotations 	Vloží čísla a stran a anotace. Anotace bude vložena do spodního levého rohu stránky.	<ol style="list-style-type: none"> Otevřete či vytvořte dokument. Klikněte na knoflík Annotate Pages. Napište anotaci do šablony a klikněte OK. Můžete použít: <ul style="list-style-type: none"> * \$P—vloží číslo strany * \$N—vloží název strany (mohou být vloženy použitím funkce Rename Pages nebo Pages/Rename) Do anotace můžete vložit i fixní text.
Create HTML 	Exportuje zvolené strany do souboru HTML. Pozn.: Pouze u verze ChemSketch 4.01 a vyšší.	<ul style="list-style-type: none"> Další informace viz soubor <i>FillTmpHelp.doc</i> v adresáři Goodies.
Sketch-To-SDF Converter 	Exportuje všechny struktury z aktivní strany či celého dokumentu do souboru SDF.	<ol style="list-style-type: none"> Otevřete stranu se strukturami k exportu. Zvolte knoflík a určete zda budete přetvářet stránku či celý dokument. Klikněte OK. Specifikujte jméno a cestu souboru SDF. Pokud zadáte jenom název, program umístí soubor do téhož adresáře, ve kterém je soubor expsdf.bas.
Explicit Hydrogens 	Zobrazí vodíky ve struktuře.	<ul style="list-style-type: none"> Nakreslete strukturu(y) na stranu a klikněte na knoflík. Pozn.: pro opačný pochod máte standardní pokyn ChemSketch—Tools/Remove Explicit Hydrogens.
Remove Spectator Ions (Desalt) 	SDF soubor, který obsahuje sloučeniny ve formě solí může být změněn na SDF soubor obsahující v každém záznamu pouze jednu molekulu. Tento knoflík odejme nejmenší ion buď podle hmoty nebo počtu atomů. Např. octan sodný bude přeměněn na kyselinu octovou. (Pozn.: vytvořená molekula bude zobrazena bez náboje.)	<ol style="list-style-type: none"> Určete název a cestu souboru SDF. Pokud napíšete jen název, bude hledán v adresáři Goodies. Definujte kritérium malé části, hmotu či atom. Vytvořený soubor SDF bude v témže adresáři jako původní, pod jménem newfile.sdf. V adresáři Goodies je ukázkový soubor " <i>salts.sdf</i> " s 5 solemi pro testování. Pozn.: použijte Goody "Import SDF" k prověření Newfile.sdf.
Nucleic Acid Builder 	Vytvoří 3D nukleovou kyselinu (DNA, RNA) (jeden či dva řetězce) ze vstupní sekvence.	<ul style="list-style-type: none"> Klikněte na knoflík a následujte pokyny.

14. Závěr

Dík za to, že jste zvolili pro svou práci ACD/ChemSketch. Vynasnažili jsme se vytvořit kreslicí program snadno použitelný a získali jsme jeden z neúčinnějších chemických kreslicích programů na trhu. Ke dni překladu, tj. červenci 2002 bylo registrováno více než 180 tisíc kopií ACD/ChemSketch. I z toho plyne, že je důvod k takové popularitě!

Tím, že jste se naučili, podle kapitoly 3, zacházet se základními funkcemi můžete začít se seriózní prací. Kapitola 4 přinesla na váš horizont koncepci I-Lab. Zbylé kapitoly pak z vás udělaly vysoce pokročilého uživatele ChemSketch, a my vás tímto vítáme do „klubu“, do kterého je vítán každý guru ChemSketch.

Tento stručný úvod v kombinaci s online Help vám umožní plně rozvinout vaši práci s tímto obširným ale intuitivně ovládaným balíkem programů. Při vzácné nutnosti potřeby konzultace či pomoci, či při vítané odezvě na tento manuál kontaktujte společnost ACD (v angličtině) či SciTech (v češtině a slovenčině); viz též Kapitolu 1.8.

A navíc ...



Vyhrajte!!!
Pomozte nám
tento návod dále
zlepšovat.

Jakmile máte za sebou čtení tohoto návodu, rádi uslyšíme váš názor. Jak bycho mohli příští vydání zlepšit? Máme malý dotazníček k vyplnění. Všichni, kdo tak učiní stanou se účastníky slosování o cenu „ACD/ChemFolder“ (či ekvivalentní slevu při nákupu software ACD). Použijte prosíme MS Word 6.0 a vyšší k otevření souboru „survey.doc“ anebo použijte Adobe Acrobat Reader k otevření „survey.pdf“ na CD, které jste obdrželi s tímto programem, nebo navštivte stranu „Feedback“ na URL <http://www.acdlabs.com/feedback/guides.html>. Vítěz je vyhlašován každoročně.

NEPRODEJNÉ

Vydal SciTech sro, Nad Šárkou 75, 160 00 Praha 6

ISBN 80-902290-0-X



9 788090 229006