

# Návod pro práci s programem ACD/ChemSketch

verze 12

## 1) Šťučně o ChemSketchi

Program ACD/ChemSketch slouží ke kreslení **chemických struktur** včetně jejich **vizualizace** a hodí se pro kreslení i jiné chemické grafiky (např. **chemických aparatur**).


## 2) Získání programu

Program ACD/ChemSketch **Freeware** je k dispozici ke stažení na internetové adrese <http://www.acdlabs.com/resources/freeware/chemsketch/>. Aktuální verze nese číslo 14.

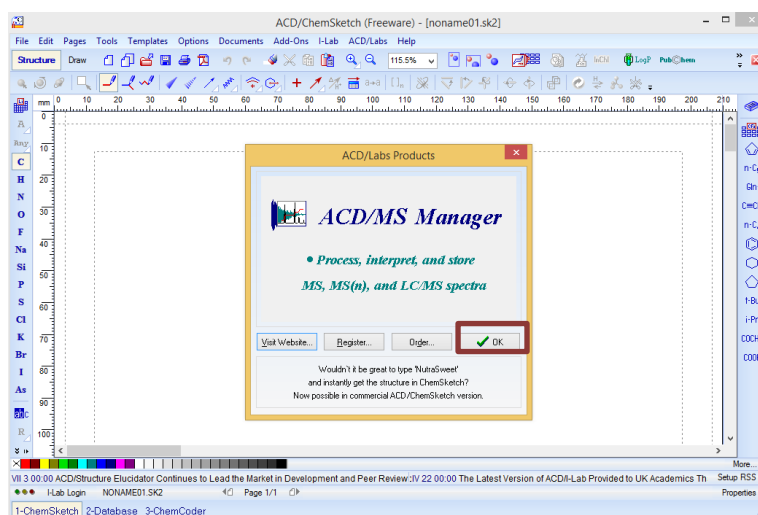
V multimediální učebně je nainstalována verze č. 12, k níž se vztahuje i tento návod (a lze ji stáhnout např. zde <http://www.slunecnice.cz/sw/acd-chemsketch/>). Freewarová verze je zdarma pouze pro osobní potřebu či výukové účely.

## 3) Spuštění programu



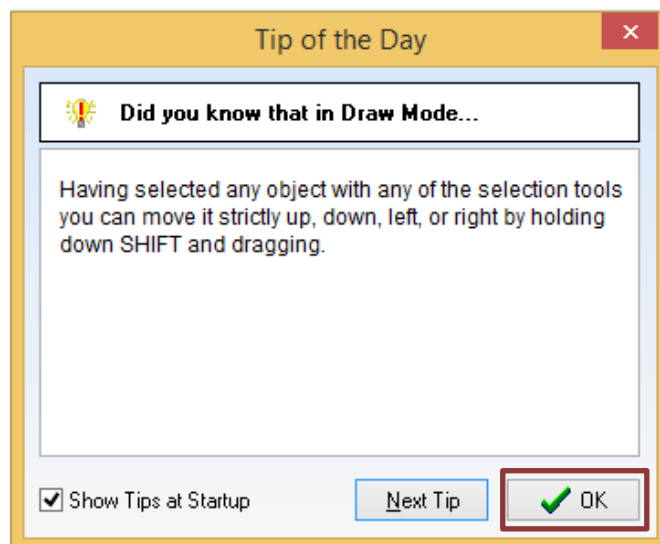
Program se spouští přes ikonu  nebo z nabídky **Start** → **Všechny programy** zvolte **ACD/Labs 12.0** a potom **ChemSketch**.

Otevře se **pracovní prostředí programu** (v záhlaví příslušného okna naleznete nápis **ACD/ChemSketch (Freeware) - [noname01.sk2]**).




Obrázek 1: Pracovní prostředí programu a dialogové okno ACD/Labs Products

Dále Vás uvítá okno **ACD/Labs Products**, které uzavřete kliknutím na tlačítko **OK**.<sup>1</sup> Následně se otevře okno automatické nápovědy **Tip of the Day**. Kliknutím na **Next Tip** si zobrazíte další nápovědu a odškrtnutím pole **Show Tips at Startup** byste mohli zrušit zobrazení nápovědy po spuštění programu (prosím neprovádějte). Okno zavřete kliknutím na **OK**, čímž se dostanete již do samotného pracovního prostředí.



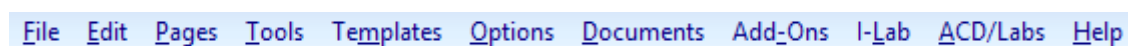
## 4) Prostředí Structure/Draw

ChemSketch pracuje ve dvou základních prostředích: **Structure** a **Draw**, mezi nimiž se přepíná tlačítky

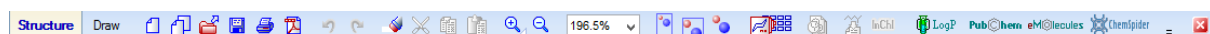
 umístěnými v levém horním rohu obrazovky. V prostředí **Structure** lze kreslit chemické vzorce (struktury) a reakční schémata, zatímco **Draw** slouží ke kreslení jiných grafických objektů.

**Pracovní prostředí** se skládá z následujících prvků, které jsou v režimu Structure/Draw velmi podobně uspořádané.

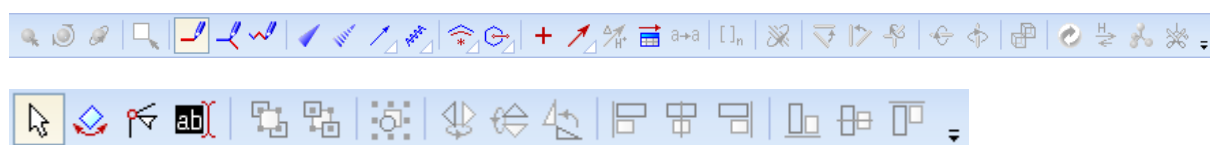
### Menu



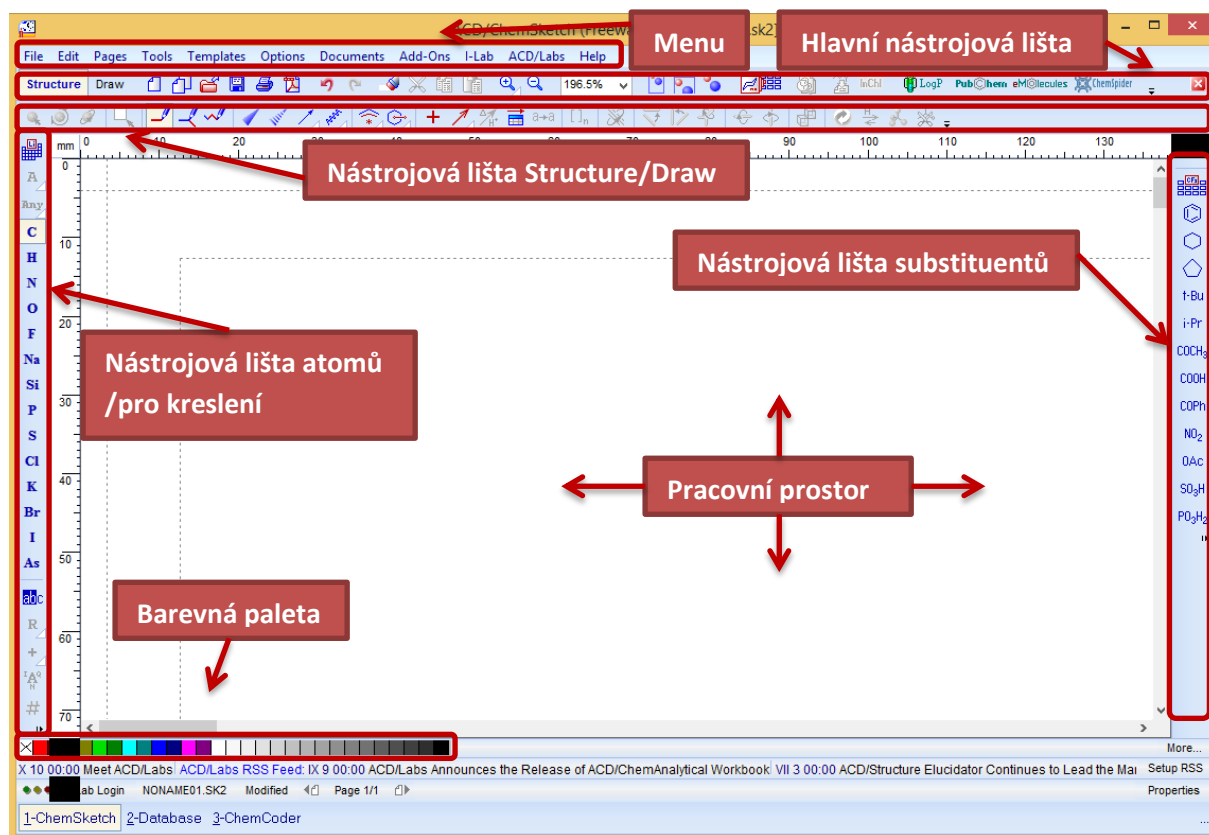
### Hlavní nástrojová lišta (zkráceně hlavní lišta)



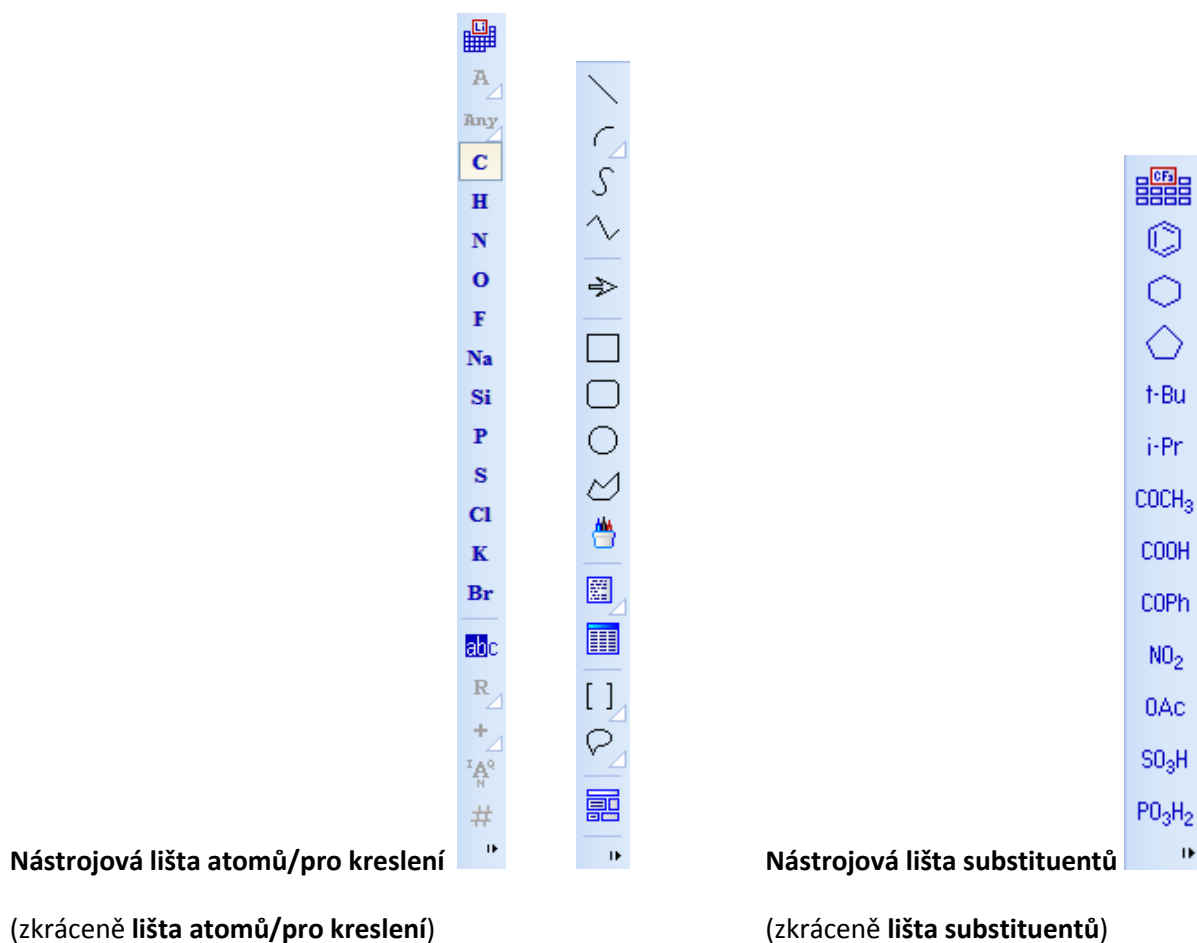
### Nástrojová lišta Structure/Draw (zkráceně lišta Structure/Draw)



<sup>1</sup> Pokud chcete, aby se při následujících spouštěních programu okno neotevíralo, z nabídky **Help** zvolíte **ACD/Labs Products** a odškrtnete pole u **Show this Screen at Startup**.





Obrázek 2: Celkové uspořádání pracovního prostředí programu



## Barevná paleta




## 5) Štránky dokumentu, práce s více dokumenty


**Novou stránku** vložíte do dokumentu pomocí **Menu – Pages – New** (mezi stránkami pak přecházíme pomocí ikony  **Page 2/2**  pod lištou barev).

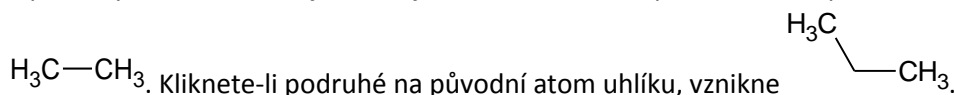
Kromě dokumentu, ve kterém si budete zkoušet vytváření struktur, můžete využít pomocný dokument **Chemsketch\_podpurny.sk2**. Mezi oběma dokumenty se můžete přepínat pomocí **Menu – Documents**.

## 6) Prostředí Structure

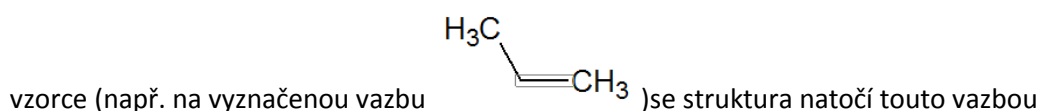
### a) Normální kreslení (Draw Normal)

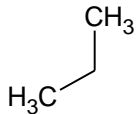
1. V prostředí **Structure** vyberte ikonu **Draw Normal**  v **Nástrojové liště Structure** (pokud jste po spuštění programu neklikli na jinou ikonu **lišty Structure**, je ikona **Draw Normal** ve výchozím nastavení vybraná).

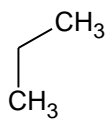
2. Vyberte **atom uhlíku**  v **Nástrojové liště atomů** (také defaultně vybraný).
3. Kliknutím levým tlačítkem do volného pracovního prostoru se vykreslí **CH<sub>4</sub>**. Kliknutím jinam do prostoru se vykreslí další molekula **CH<sub>4</sub>**.
4. Opětovným kliknutím **na** již existující molekulu **CH<sub>4</sub>** se přidá **–CH<sub>3</sub>** skupina a vznikne



5. Kliknutím na ikonu **Set Bond Vertically**  a kliknutím na jakoukoli vazbu vytvořeného

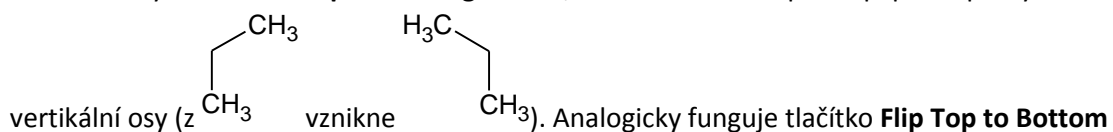



vertikálně (svisle), v uvedeném příkladu takto: . Kliknete-li znovu na tutéž vazbu, struktura se nám přetočí do další varianty, při níž je vybraná vazba natočena vertikálně



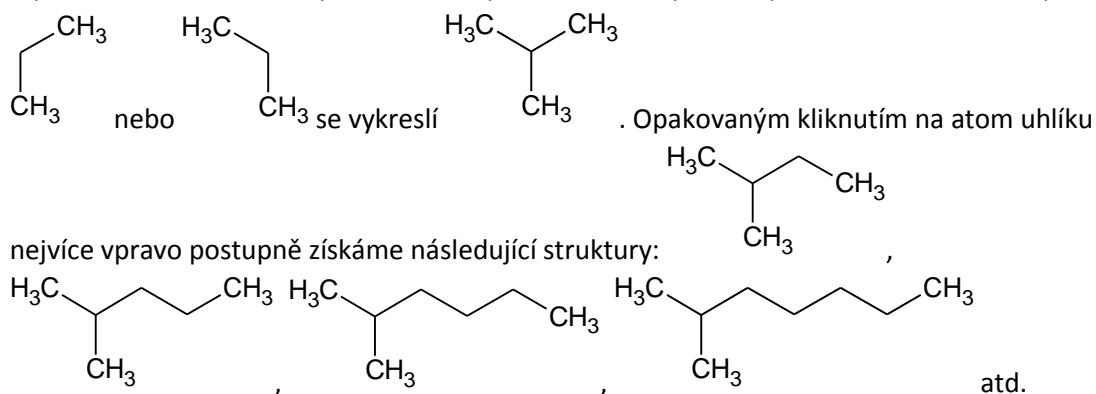
. Analogicky funguje ikona **Set Bond Horizontally** .

6. Kliknete-li nyní na ikonu **Flip Left to Right** , struktura se nám překlopí podél pomyslné



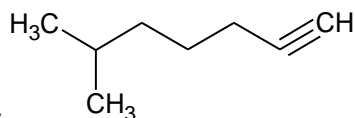
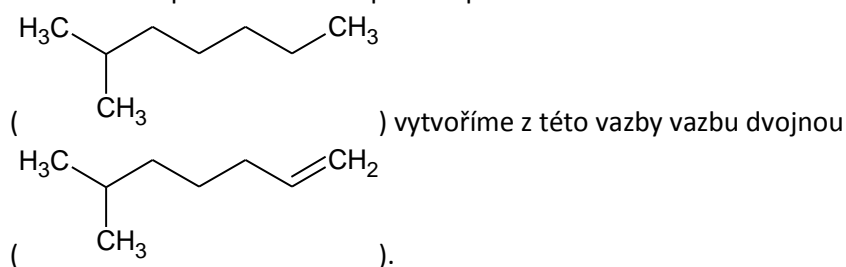
(překlopení podél pomyslné horizontální osy struktury), či **Flip on Bond**  (překlopení podél pomyslné osy struktury procházející vybranou vazbou).

7. V prostředí **Draw Normal** po kliknutí na prostřední (nevyznačený) atom uhlíku struktury




## b) Dvojně a trojně vazby

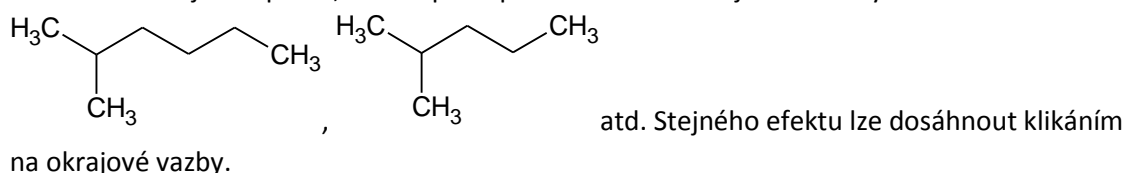
1. **Kliknutím na poslední vazbu** vpravo v poslední nakreslení struktuře




2. **Druhým kliknutím na tuto vazbu** vznikne vazba trojná:  
 3. **Třetím kliknutím na tuto vazbu** vznikne opět vazba jednoduchá.

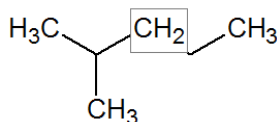
## c) Mazání atomů

1. Po kliknutí na ikonu **Delete**  v **Hlavní nástrojové liště** a následném najetí na některý atom či skupinu atomů v již nakreslené struktuře se objeví velká černá šipka s nápisem **DEL** a po kliknutí jsou tyto atomy smazány. Budete-li takto postupně klikat na atomy uhlíku ve struktuře nejvíce vpravo, budou postupně vznikat následující struktury:

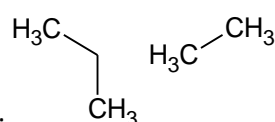


2. Efektu mazání lze také dosáhnout pomocí ikony **Select/Move**  v **liště Structure** a následného označení atomu/skupiny atomů, jež má být vymazána společně se stiskem klávesy **Delete**.

3. Vyberete-li pomocí ikony **Delete** atomy nebo vazby **uprostřed řetězce** (např. jako na obrázku



), dojde k **rozpojení řetězce**:




. Stejného efektu

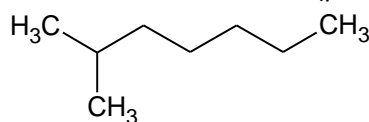
lze dosáhnout pomocí ikony **Select/Move** a klávesy **Delete**.

## d) Zrušení akce

1. Pokud provedete nechtěnou operaci, můžete ji vrátit zpět pomocí ikony **Undo** (Zrušit) .

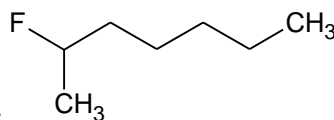
Jakmile využijete tlačítko **Undo** (můžete i několikrát za sebou), je aktivována ikona **Redo** (Předělat) , která vrací změny provedené ikonou **Undo**.

2. Stejného efektu lze dosáhnout pomocí klávesových zkratk **Ctrl+Z – Undo**, **Ctrl+Y – Redo**.  
3. Vyzkoušejte si uvedené ikony či zkratky a nakonec získajte zpět původní strukturu z bodu 6 oddílu **Normální kreslení** (před vysvětlováním násobných vazeb), tedy




## e) Výměna atomů

1. Kliknutím např. na atom fluoru **F**  v **liště atomů** a následným kliknutím na levý uhlíkový

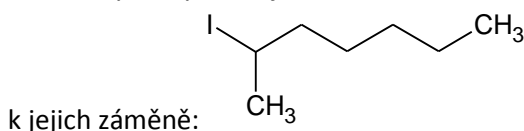


atom se tento změní v atom fluoru:


2. Pokud některý atom (např. **I**) není v liště atomů, stačí kliknout na **ikonu periodické tabulky**

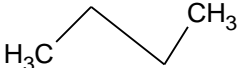
v téže liště  a atom z ní vybrat a následně potvrdit tlačítkem **OK**. Tím dojde k zaznamenání atomu do **liště atomů**.

3. Máte-li vybraný atom jodu **I** v **liště atomů** a kliknete na atom fluoru v naší struktuře, dojde




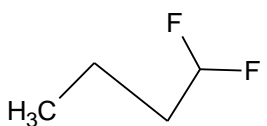
## f) Nepřetržité kreslení (Draw Continuous)

1. Pokud v režimu **Normálního kreslení** a vybraném atomu **C** kliknete na dvě volná místa pracovní plochy, vzniknou dvě skupiny  $\text{CH}_4$ .
2. Pokud přejdete do režimu **Nepřetržitého kreslení (Draw Continuous)**, ikona , vyberete atom **C** a opět kliknete na dvě volná místa pracovní plochy, vznikne molekula **ethanu**, dále


**propanu, butanu**  atd. Kreslení ukončíte např. kliknutím na tlačítko **Select/Move** (dále také **pravým tlačítkem myši** či klávesou **Esc**). V tomto režimu mohou být vazby kresleny pouze z černě zvýrazněného atomu. Automaticky je to poslední nakreslený atom. Chcete-li kreslit vazby z jiného atomu, stačí na něj kliknout, čímž se zvýrazní.

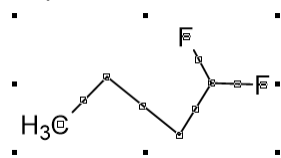
3. Chcete-li v režimu **Nepřetržitého kreslení nahradit atomy vodíku** např. **atomy fluoru**, musíme: a) v liště atomů vybrat atom fluoru, b) označit kliknutím atom uhlíku (např. ten úplně vpravo v butanu), na který se má fluor navázat, c) dalším kliknutím na tento atom

uhlíku dojde k navázání fluoru:  . Chcete-li navázat další atom fluoru, musíme postup b), c) opakovat – označit atom uhlíku a dalším kliknutím navázat fluor



## g) Vybrání, přemístění, kopírování a mazání struktury

1. Pomocí ikony **Select/Move**  lze **vybrat** příslušnou **strukturu** a to tak, že kliknete do prostoru uvnitř obdélníkové plochy vymezené krajními atomy struktury:




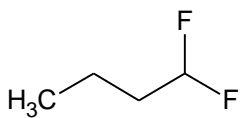
- Strukturu lze také vybrat kliknutím a tažením myši (při vybrané ikoně **Select/Move**). Při stisknutí klávese **Shift** takto můžete vybrat více struktur.
2. Po najezení myši na některý z atomů nebo některou z vazeb struktury (u kurzoru se objeví černý křížek) lze tažením myši tuto strukturu **přemístit na pracovní ploše**. Uvolněním myši dojde k umístění struktury.
3. Tlačítko **Select/Move** lze také použít pro rychlé **vykopírování struktury** do jiného programu, např. **MS Word**. Stačí strukturu označit, zkopírovat pomocí zkratky **Ctrl+C** a vložit do daného programu pomocí zkratky **Ctrl+V**. Strukturu také můžete zkopírovat přímo **do ChemSketchu**. Po stisknutí **Ctrl+C** a **Ctrl+V** se objeví náhled struktury, kterou snadno umístíte na vybrané

místo kliknutím myši. Pokud si vložení zkopírované struktury **rozmyslíte**, stačí stisknout **pravé tlačítko myši**.

4. Vyberete-li pomocí **Select/Move** strukturu, nebo více struktur a stisknete-li klávesu **Delete**, dojde k jejich vymazání. Můžete tak vymazat kopii právě vložené struktury z bodu 3.

## h) Vyčištění struktury

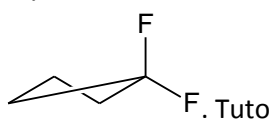
1. Vyberte strukturu nakreslenou v rámci nepřetržitého kreslení (viz oddíl g)) pomocí ikony **Select/Move**.
2. Následně stisknete ikonu **Clean Structure** (Vyčištění struktury)  na **Nástrojové liště Structure**, čímž se optimalizují všechny vazebné délky a úhly v nakreslené struktuře:



3. Pokud stisknete ikonu **Clean Structure** aniž by byla vybrána konkrétní struktura, optimalizují se **všechny struktury na stránce**. Také jiné ikony (např. otáčení struktury podle vazby) se aplikují na všechny struktury na stránce, pokud nevyberete jednu strukturu.

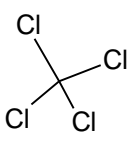
## i) Tažení myši

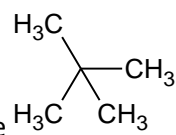
1. V prostředí **Draw Normal** či **Draw Continuous** lze využít tažení myši.
2. **Táhnutím myši od jednoho atomu ke druhému** (např. mezi dvěma skupinami CH<sub>3</sub>) se vykreslí jednoduchá vazba mezi těmito atomy.
3. **Tažením myši od vybraného atomu do volného prostoru** se vloží nový atom na konec kreslené vazby. **Naopak tažením myši z volného prostoru k atomu** se vloží atom na začátek nové vazby.
4. Zkuste táhnout myši ve struktuře z bodu 2 oddílu n) Vyčištění struktury: od levého atomu

uhlíku k atomu uhlíku nejvíce vpravo. Vznikne následující struktura: . Tuto

strukturu optimalizujeme pomocí **Clean Structure**: .

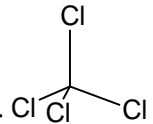
## j) Prostorové vazby



1. Nakreslete strukturní vzorec tetrachlormethanu **CCl<sub>4</sub>**: . (Např. pomocí **Draw**



**Normal** nakreslíme , kde následně nahradíme methylové skupiny atomy chloru.)

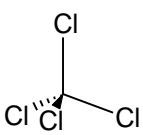


2. Vyberete strukturu a kliknete na ikonu **3D Optimization**  v liště **Structure**. Tím nám bude



umožněno pomocí myši natočit strukturu do následující polohy: .

3. Nyní pomocí ikon  a  můžete vyznačit prostorové vlastnosti vazeb. Vyberete ikonu a následně označíme příslušnou vazbu:

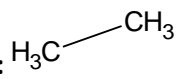

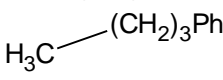
- ikona  slouží k vytvoření **vazeb orientovaných směrem k nám**,
- ikona  slouží k vytvoření **vazeb orientovaných od nás pryč**,


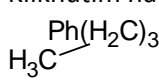
- vytvoříme následující strukturu: .

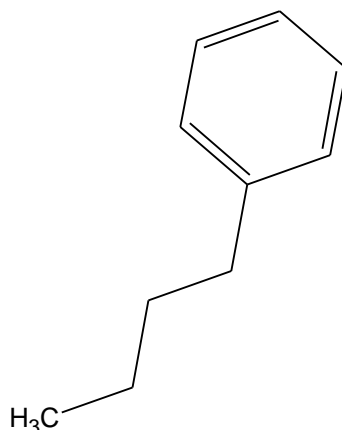
4. Podobně fungují následující ikony:

- ikona  slouží k vytvoření **koordinčních vazeb**,
- ikona  slouží k vytvoření **neurčitých vazeb**,
- kliknutím do pravého dolního rohu obou ikon můžete vybrat různá typy těchto vazeb.


## K) Složitější substituenty

1. Nakreslete ethan, např. v režimu **Draw Continuous**: .
2. V liště **atomů** vyberte ikonu **Edit Atom Label**  a klikněte na pravou methylovou skupinu. Tato ikona umožňuje nahradit popis koncového atomu písmennými zkratkami.
3. Zapište do textového pole v nově otevřeném dialogovém okně **Edit Label** „(CH<sub>2</sub>)<sub>3</sub>Ph“. Povšimněme si, že jakmile napíšete číslo, automaticky se z něj vytvoří dolní index, ve výsledku tedy budete mít napsáno: **(CH<sub>2</sub>)<sub>3</sub>Ph**. Následně aktivujeme tlačítko **Insert**, čímž dostanete následující strukturu: .

4. Kliknutím na ikonu **Change Position**  se změní orientace připojeného substituentu: .
5. Klikněme na **Edit Atom Label** a označme náš nový substituent **(CH<sub>2</sub>)<sub>3</sub>Ph** v dané struktuře. V dialogovém okně **Edit Label** pak klikněme na tlačítko **Expand**. Popisek se rozvine do strukturního vzorce:



## l) Kreslení řetězců (Draw Chains)

1. Kliknutím na ikonu **Draw Chains**  (při vybraném atomu **C**), kliknutím do pracovního prostoru a tažením myši se vytváří uhlovodíkový řetězec. Zároveň program pomocí čísel napovídá, kolik atomů uhlíku je již nakresleno. Přestanete-li táhnout u **C 5**, nakreslíme

**pentan:**  $\text{H}_3\text{C}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_3$

2. Chcete-li substituovat některý z vodíků, vyberete substituent (např. **F**) a kliknete

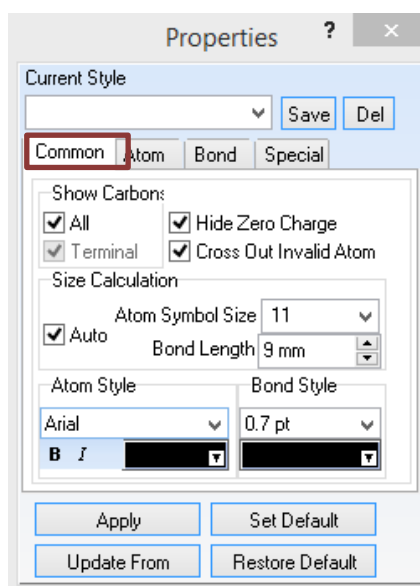
na požadovaný atom uhlíku (např. na pravý **C**):  $\text{H}_3\text{C}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CF}_3$

3. Režim **Draw Chains** také můžete využít tak, že vyjdete z **methanu**  $\text{CH}_4$  a následně kliknete na tuto skupinu. Vznikne **ethan**  $\text{H}_3\text{C}-\text{CH}_3$ . Následně můžete klikat na koncové či vnitřní uhlíky – bude docházet k větvení řetězce **pod úhlem 120°** a se **stejnými délkami vazeb**.
4. Budete-li postup z bodů 1 a 3 opakovat se stisknutou klávesou **Ctrl**, budou se vazby vykreslovat pod úhlem **180°** (v případě postupu z bodu 1 nebudou některé vazby viditelné<sup>2</sup>:  $\text{H}_3\text{C}-\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$ , v případě postupu z bodu 3 dostanete:  $\text{H}_3\text{C}-\text{CH}_3$ ).

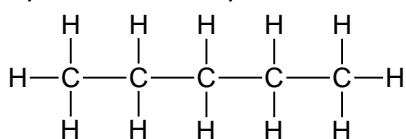
## m) Změna vlastností struktury

1. Především ve středoškolském učivu je vhodné **zobrazovat i vnitřní uhlíkové atomy**. Vyberte strukturu  $\text{H}_3\text{C}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_3$  a **dvakrát poklepejte** na některý z atomů nebo z vazeb. Alternativně můžete zvolit **Menu Tools – Structure Properties (Alt+T a Shift+P)**. Otevře se Vám dialogové okno **Properties** (Vlastnosti), které se skládá z několika záložek, jimiž se nastavují vlastnosti společné (**Common**), atomu (**Atom**), vazeb (**Bond**) a speciální vlastnosti (**Special**).

<sup>2</sup> Zviditelnit dané vazby lze zvětšením jejich délky – viz dále.

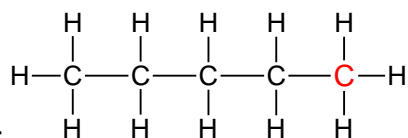


2. V defaultně zobrazené záložce **Common** můžete nastavit **zobrazování vnitřních atomů uhlíku**: zatržením **All** v sekci **Show Carbons**. Nastavení aplikujete na strukturu stisknutím tlačítka **Apply**. Dostanete stejný výsledek jako u druhé struktury:  $\text{H}_3\text{C}-\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$ .
3. V nově vytvořené struktuře se **první vazba jeví delší** než ostatní, které pro svoji malou délku nejsou vidět (překryjí je skupiny  $\text{CH}_2$ ). Pokud na první skupinu atomů třikrát použijete ikonu **Change Position**, dostanete následující výsledek:  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$ .
4. Pokud byste chtěli zobrazit vazby (tj. zvětšit jejich délku) mezi atomy uhlíku, vyberte pomocí **Select/Move** znovu právě nakreslenou strukturu a zobrazte její dialogové okno **Properties**. V záložce **Common** odškrtnete pole **Auto**. Pokud by totiž zůstalo zaškrtnuté, změnou délky vazby by se automaticky přepočítala i velikost symbolu pro atom (a naopak). Jelikož chcete, aby se zobrazovaly všechny vazby ve struktuře, nastavíme délku vazby (**Bond Length**) např. na **9 mm** a volbu potvrdíme tlačítkem **Apply**:  $\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_3$ .
5. Vybráním struktury a volbou z **Menu Tools – Add Explicit Hydrogens** dostanete



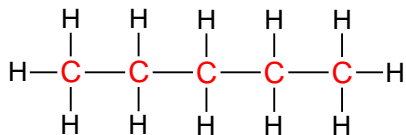
. Pro rychlejší provedení zkuste poslední **akci vrátit** (Ctrl+Z) a poté stisknout klávesové zkratky **Alt+T** a **Shift+Y** (či kombinaci **Ctrl+Shift+Y**).

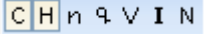
6. Kliknutím do volného prostoru odznačíte strukturu. Nyní klikněte dvakrát na některý z atomů uhlíku (např. pravý krajní). Zobrazí se záložka **Atom** okna **Properties**, kde můžete změnit jeho

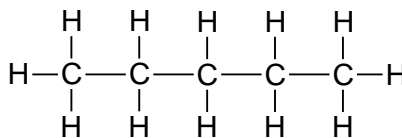


barvu (např. na červenou:  $\text{H}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{H}$ ). Změna se provede kliknutím na **Apply**. Můžete také změnit **další vlastnosti atomu** (styl písma, jeho velikost či barvu a zobrazení atomu). Zkuste např. změnit **velikost** vybraného C-atomu na **11**. Pokud chcete nastavení **aplikovat na další atomy** ve vybrané struktuře, stačí (při otevřeném dialogovém

okně **Properties**) postupně tyto atomy vybírat a opakovaně používat tlačítko **Apply**:

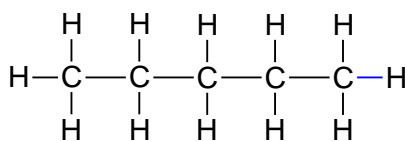


7. Výše naznačeným způsobem můžete měnit také vlastnosti atomů vodíku, popř. náboje apod. Vyberte celou strukturu a zobrazte její dialogové okno **Properties**. Přejděte na záložku **Atom** při stisknutí klávese **Shift** a vyberte kromě **C**-atomu i **H**-atom () a nastavte **velikost** obou atomů na **11** a **barvu** na **černou** (aby došlo k přebarvení C-atomů, musíte barvu



znovu vybrat), potvrďte pomocí **Apply**:

8. Podobně můžete změnit **vlastnosti** vybrané **vazby** v záložce **Bond**. Zkuste pravou krajní vazbu

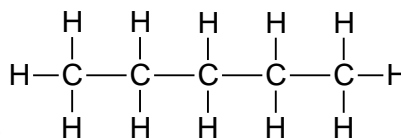


**obarvit** na modro: . Kromě **barvy** vazby můžete také měnit její **tloušťku**. Z celé struktury můžete naráz nastavit vlastnosti pro jeden **typ vazeb**



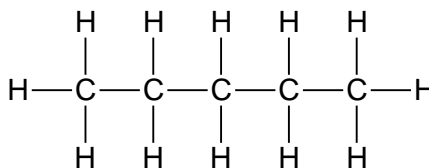
(jednoduchá, dvojná, trojná, prostorové a další vazby). Zavřete dialogové okno **Properties**.

9. Vlastnosti atomů a vazeb také můžete společně nastavovat na záložce **Common** okna



**Properties** – např. obarvit všechny vazby na černo:

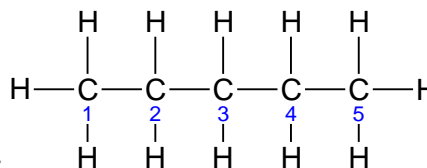
10. Pokud budete kreslit další strukturu, vnitřní atomy uhlíku se zobrazovat nebudou. Pomocí tlačítka **Set Default** v dialogovém okně **Properties** můžete nastavení uložit. Pokud nyní stejným způsobem nakreslíme pentan (**Ctrl** + **Draw chains** + **Add Explicit Hydrogens**),



získáme rovnou strukturu:


11. Pokud se chceme vrátit k výchozímu stylu **Normal**, stačí zvolit v **Menu – Options – Set Structure Drawing Style** styl **Normal** (při volbě si vybereme, zda nový styl chceme či **nechceme** aplikovat na všechny dosud nakreslené struktury). Nebo můžeme styl **Normal** aplikovat pouze na nakreslenou strukturu pomocí **Current style** v okně **Properties**.

12. Pokud chcete řetězec očíslovat, využijete ikonu **Manual Numbering** , která nám umožní



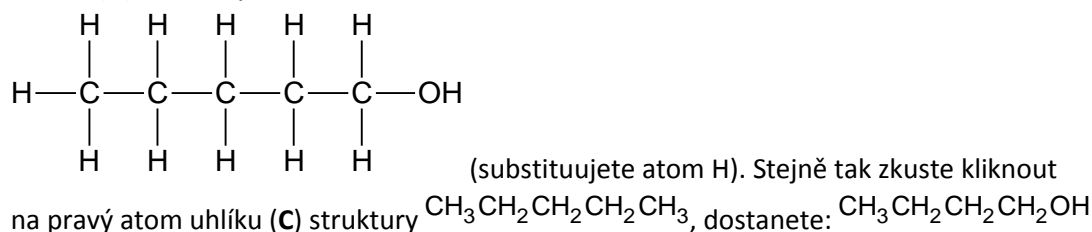
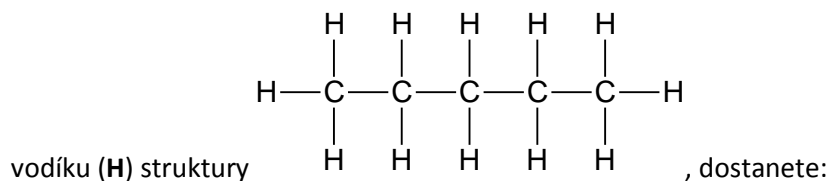
postupně označovat čísla jednotlivé atomy: . Volbou


<sup>3</sup> Oproti předchozí struktuře budou vazby **C-H** mít stejnou délku (9) jako **C-C** – tak, jak bylo uvedeno v okně **Properties** struktury při ukládání nastavení.

v **Menu Tools – Generate – Name for Structure** (či volbou ikony  v **hlavní liště**) dojde k pojmenování struktury v angličtině podle nomenklatury IUPAC („pentane“). Pokud bychom chtěli číslování řetězce odstranit, v Menu zvolíme **Tools – Clear Numbering**.

## n) Deriváty

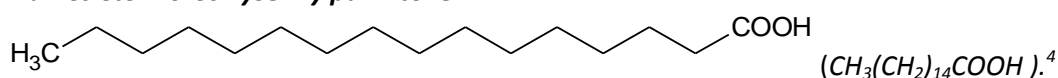
1. Z **lišty atomů** vyberte atom kyslíku (**O**) a (v režimu **Draw normal**) klikněte na pravý atom





(substituujete skupinu  $\text{CH}_3$ ). Substituci lze též provést pomocí ikony **Edit Atom label** .


### Úkol 1

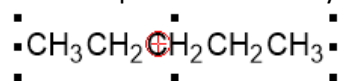
Nakreslete vzorec **kyseliny palmitové**



## o) Vybírání, Změna velikosti a rotace

1. Používáte-li ikonu **Select/Move** (v **liště Structure**) a zároveň je poblíž ní zobrazena ikona **Laso On/Off** v následujícím tvaru , vybírají se objekty (prostřednictvím kliknutí a tažení myši) jako **obdélníkové tvary**.
2. Je-li ikona **Laso On/Off** přepnuta do režimu  (stačí kliknout na obdélníkovou ikonu z bodu 1), vybírají se objekty prostřednictvím nepravidelných tvarů „házeného lasa“, které se vytvoří kliknutím a tažením myši.
3. Je-li vybrána struktura, lze ji tažením za její libovolný roh **zmenšit** nebo **zvětšit**.

4. S ikonou **Select/Rotate/Resize**  můžete kliknutím a tažením myši vybrat strukturu. Tím se nám uprostřed struktury objeví červené kolečko – **střed otáčení**:






Pokud se k tomuto kolečku přiblížíme myší, změní se kurzor v oboustrannou šipku. V tuto chvíli můžete kliknutím a tažením myši otočit strukturu kolem

<sup>4</sup> Nakreslit pomocí **Draw chains** hexadekan ( $\text{C}_{16}$ ), pomocí **Edit Atom Label** substituovat poslední  $\text{CH}_3$  skupinu, aplikovat styl **Normal** v okně **Properties** na vybranou strukturu)


vyznačeného středu:  $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-CH}_3$ . Pokud **chcete změnit střed otáčení**, stačí jen na něj kliknout a tažením myši jej posunout.

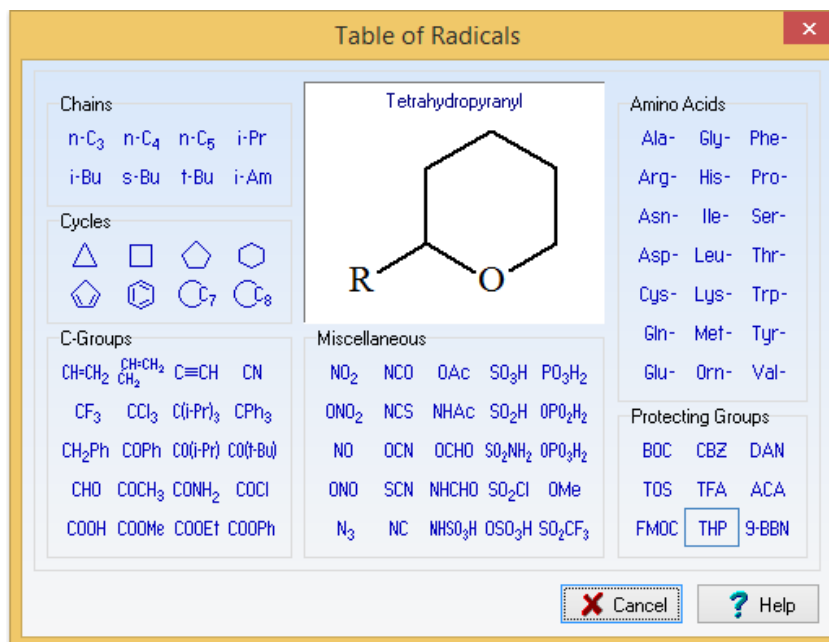
## p) Chemické reakce

1. K vyznačení slučovaných sloučenin použijete ikonu **Reaction Plus**  z lišty **Structure**.
2. Pro zápis chemických reakcí využijete ikonu **Reaction Arrow** . Kliknutím do pravého dolního rohu ikony můžete vybrat různé typy reakčních šipek. Šipka se vykreslí kliknutím a tažením myši.
3. Pokud chcete šipku doplnit o text nad či pod šipkou, vyberete ikonu **Reaction Arrow Labeling**  s jejíž pomocí označíme příslušnou šipku. V nově otevřeném dialogovém okně **Edit Reaction Conditions** pak do textových polí nad a pod šipkou zapíšete požadované údaje.

## q) Šablony

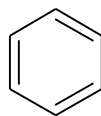
Složité struktury nemusíme kreslit celé od začátku, ale můžete využít předdefinovaných šablon. Pro tyto účely lze využít:

- ikonu **Table of Radicals (Tabulka substituentů)**  v liště **substituentů** – po jejíž aktivaci můžete vybírat z několika možných substituentů (zde vidíte další možnost, jak substituovat karboxylovou skupinu).



Obrázek 3: Tabulka substituentů

1. Změníme styl kreslení na **Normal (Options – Set Structure Drawing Style)**.




2. V **Tabulce substituentů** zvolme **benzen** a kliknutím jej umístíme do pracovního prostoru. Po použití substituentu se jemu příslušná ikona objeví v liště substituentů (pokud tam již nebyla dříve, jako benzen).

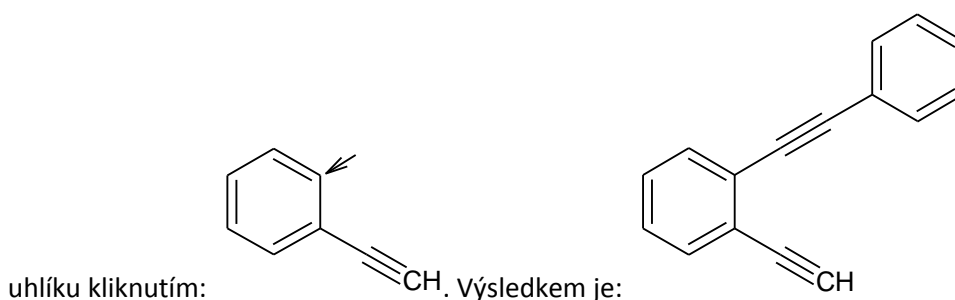
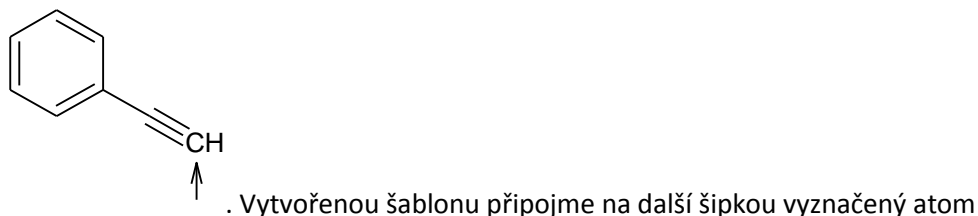



3. V **tabulce substituentů** zvolme **ethynyl** a klikněme na šipkou vyznačený



- ikonu **Instant Template**  v liště **Structure** – s jejíž pomocí můžete označit libovolnou námi nakreslenou strukturu jako šablonu – stačí s pomocí ikony označit místo připojení (atom, nebo vazbu) a vytvořenou šablonu někam vložit.

1. Pomocí ikony **Instant Template** označme šipkou vyznačený atom uhlíku



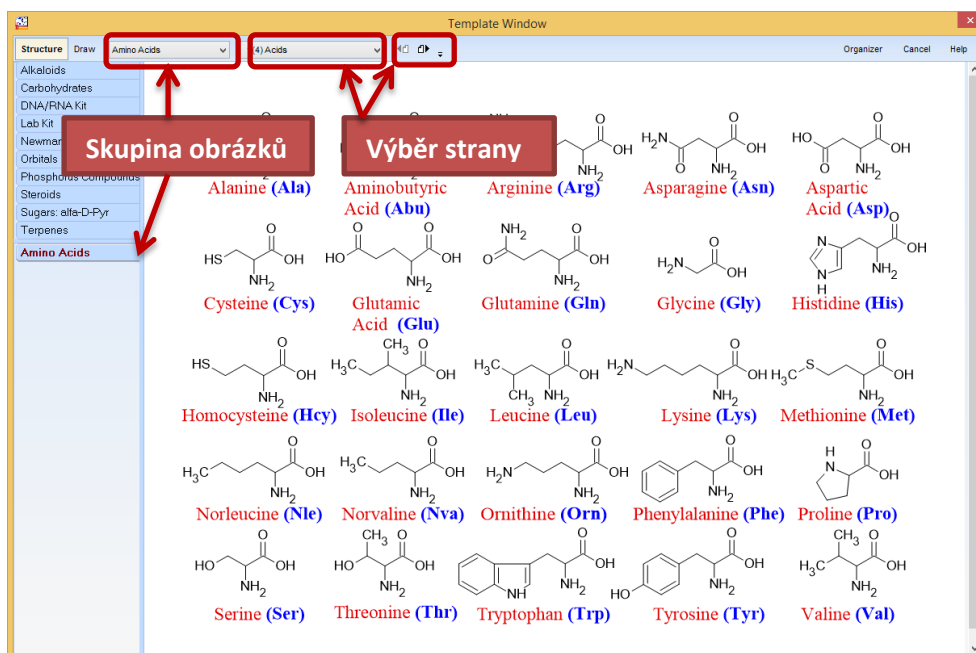
- ikonu **Open Template Window (Otevřít Okno Šablon)**  v **hlavní liště** (nebo klávesu **F5**) – po jejíž aktivaci můžete vybírat z mnoha předdefinovaných struktur.

Kromě **skupin chemických vzorců** (např. **DNA/RNA Kit**, **Amino Acids**) zde najdete skupiny, které využijete při kreslení v prostředí **Draw: Lab Kit**, **Newman Projections** a **Orbitals**. Obrázek vyberete kliknutím a dalším kliknutím jej umístíme do pracovního prostoru (v případě posledních tří uvedených skupin budete automaticky přepnuti do prostředí **Draw**).

Námi nakreslenou chemickou strukturu lze se strukturou ze šablony sjednotit třemi způsoby:

- přenést stín šablony kurzorem nad vazbu tak, že vazby, které mají být sjednoceny, se překrývají a pak kliknout,
- zamířit stínem šablony na atom struktury, ke kterému ji hodláte připojit, až se objeví vazba a kliknout,

- ukázat atomem šablony na atom, se kterým se má spojit spiro-vazbou, a zároveň držet stisknutou klávesu SHIFT a kliknout.<sup>5</sup>



Obrázek 4: Okno šablon v prostředí Structure, skupina Amino Acids, strana 1

## r) Ukládání struktur

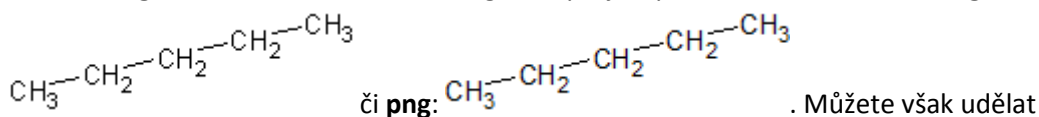
Vytvořený soubor můžete uložit pomocí **Menu – File – Save As** (klávesová zkratka **Ctrl+Shift+S**). Pokud chcete se vzorci dále pracovat, je třeba je uložit ve formátu **sk2** (ChemSketch 2.0 Document). Tím uložíme všechny struktury na aktivní stránce. Pokud bychom chtěli uložit pouze jeden vzorec:

- můžete ho před samotným uložením **vykopírovat do prázdného dokumentu na první stránku**;
- vzorec označíme a **vykopírujete do externího programu** (např. IrfanView),
- uložíme všechny vzorce na stránce a **v externím programu ořízneme jednotlivé vzorce** (např. v IrfanView pomocí označení oblasti kliknutím a tažením myši a následné zkratky oříznutí **Ctrl+Y**)

Do **MS Word** nebo **PowerPoint** lze obrázky vkládat přímo pomocí zkratk **Ctrl+C** a **Ctrl+V**. Pokud se

Vám vložený vzorec (např.  $\text{CH}_3\text{---CH}_2\text{---CH}_2\text{---CH}_2\text{---CH}_3$ ) zdá příliš kostřbatý, je několik možností, jak jej vylepšit:

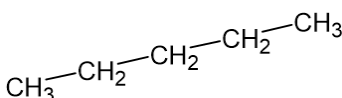
- V **Menu programu ChemSketch Options – Preferences** v záložce **General** zatrhnout **Use Antialiasing**. Bohužel, funkce antialiasing se neprojeví při ukládání ve formátech **gif**:



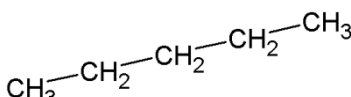
<sup>5</sup> Pozn. Stín šablony lze překloupat použitím klávesy TAB.

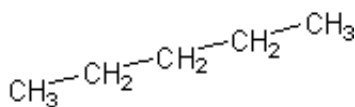


náhled stránky (klávesa **Print Screen**) a pomocí **Ctrl+V** jej vložit do programu **IrfanView**, kde

vzorec oříznete. Výsledek  je v kvalitě dostačující např. **pro webové stránky**.

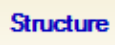

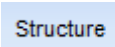
- b) Pokud chcete kvalitnější výstup (např. pro tištěné publikace), obrázek vyexportujete jako **tif** (není potřeba zapínat funkci Antialiasing). Při ukládání se pod polem se zvolenou příponou soboru objeví tlačítko **Options**, v němž je možné změnit rozlišení výstupního souboru.

Defaultně je nastaveno 300 DPI: , což je pro tištěné publikace vhodný. Zvolíte-li např. 90 DPI, obrázek již vypadá poněkud hůře:














Závěrem si dovoluji doporučit internetový odkaz <http://www.martinsvehla.cz/database/>, na němž najdete hotové vzorce a rovnice z organické chemie a biochemie ke stažení. Vzorce jsou jak ve formátu umožňujícím jejich editaci v programu ChemSketch (**sk2**), tak ve formátu **tif** a **pdf**. Stejná databáze je dostupná na adrese <http://www.studiumchemie.cz/templaty.php>. Avšak první odkaz umožňuje celou databázi stáhnout na jedno kliknutí. Vzorce ve formátu **sk2** lze pomocí **Menu – File – Open (Ctrl+O)** otevřít v programu ChemSketch a následně je upravit, např. barevně zvýraznit atomy apod.










## 7) Prostředí Draw











Pro práci v prostředí **Draw** je třeba se do něj nejdříve přepnout pomocí ikony  . Takto ikona  vypadá, pokud již v prostředí **Draw** pracujete. Prostředí je vhodné zejména pro **kreslení chemických aparatur**.

### Popis Nástrojové lišty Draw:



|   |  |
|---|--|
|    | <b>Select/Move/Resize</b> (Šipka pro výběr, pohyb a změnu velikosti objektu)                 |
|    | <b>Select/Move/Rotate</b> (Výběr, pohyb a otočení objektu)                                   |
|    | <b>Edit Nodes</b> (Úprava uzlů objektu)  |
|    | <b>Edit Text</b> (Upravit text)  |
|    | <b>Bring to Front</b> (Přenést objekt do popředí)  |
|    | <b>Send to Back</b> (Přenést objekt do pozadí)   |
|    | <b>Group</b> (Seskupit/Rozdělit objekty)   |
|   | <b>Flip Left to Right</b> (Překlopení zleva doprava - podél pomyslné vertikální osy objektu) |
|  | <b>Flip Top to Bottom</b> (Překlopení shora dolů - podél pomyslné horizontální osy objektu)  |
|  | <b>Rotate 90°</b> (Otočení o 90°)  |
|  | <b>Align</b> (Zarovnání vybraných objektů)   |

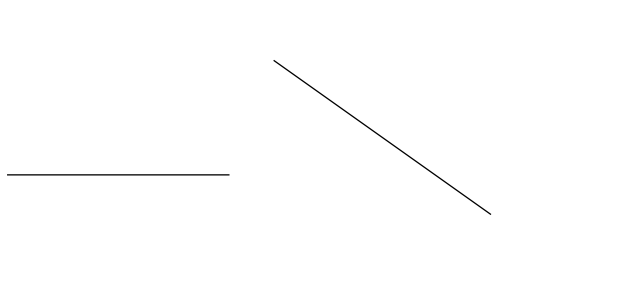
### Popis Nástrojové lišty pro kreslení

|   |  |
|---|--|
|  | <b>Line</b> (Rovná čára)                     |
|  | <b>Arc</b> (Oblouček)                        |
|  | <b>Curve</b> (Křivka)                        |
|  | <b>Polyline</b> (Více spojených čar)         |
|  | <b>Arrow</b> (Kreslení šipky)                |
|  | <b>Rectangle</b> (Obdélník)                  |
|  | <b>Rounded Rectangle</b> (Zaoblený obdélník) |
|  | <b>Ellipse</b> (Elipsa)                      |
|  | <b>Polygon</b> (Mnohoúhelník)                |

|   |   |
|---|---|
|    | <b>Insert Image</b> (Vložit obrázek)  |
| <br>  | <b>Text</b> (Text)<br><b>Text (Formátovaný text)</b> a <b>Artistic Text</b> (Umělecký text) |
|    | <b>Table</b> (Tabulka)  |
| <br><br> | <b>Brackets</b> (Závorky)   |
| <br>  | <b>Rounded Callout</b> (Popisky)  |
|    | <b>Report Template</b> (Šablona zprávy pro ACD/SpecManager)                                 |



## a) Kreslení čar a křivek

- Pomocí **Šipky Select/Move/Resize**  (umožňující **výběr, pohyb a změnu velikosti** nakreslených objektů, zkráceně **Šipka**), která je defaultně vybrána po přejití do režimu **Draw**, vyberte ikonu **Line**  (**Rovná čára**). Kliknutím do volného pracovního prostoru a tažením myši vytvoříte rovnou čáru. Její vykreslování ukončíte uvolněním tlačítka myši. Zkuste

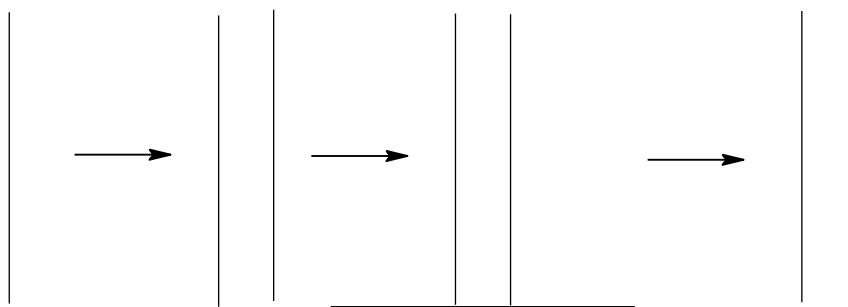


nakreslit tyto rovné čáry:

- Pomocí **Ctrl+C** a **Ctrl+V** zkopírujte poslední svislou čáru a kliknutím ji **vložte napravo** od původní čáry. Zkuste čáry umístit tak, aby byly **vertikálně umístěny ve stejné výšce**. K tomu Vám může pomoci třetí čára, která bude na obě čáry kolmá, a k jejímuž spodku obě čáry srovnáte. Pro přesnější práci si můžete pracovní prostředí **zvětšit** pomocí **Lupy + (Zoom**

**In)** či nastavit velikost **přiblížení v procentech**    nebo použít **skrolování myši k sobě** při stisknuté klávese **Ctrl**. Pro **oddálení** lze použít analogické postupy : **Lupu – (Zoom Out)**, nastavit **oddálení v procentech** či **skrolovat opačným směrem**. Abyste dostali obě čáry přesně vedle sebe, vyberte danou čáru pomocí **Šipky** a **posunujte** ji pomocí **šipek na klávesnici** (můžete také zkusit najet myší přímo na čáru a **přesouvat tažením myši pomocí černého křížku**). Následně pomocnou čáru **vymažte** (vyberte ji a stiskněte klávesu **Delete**,

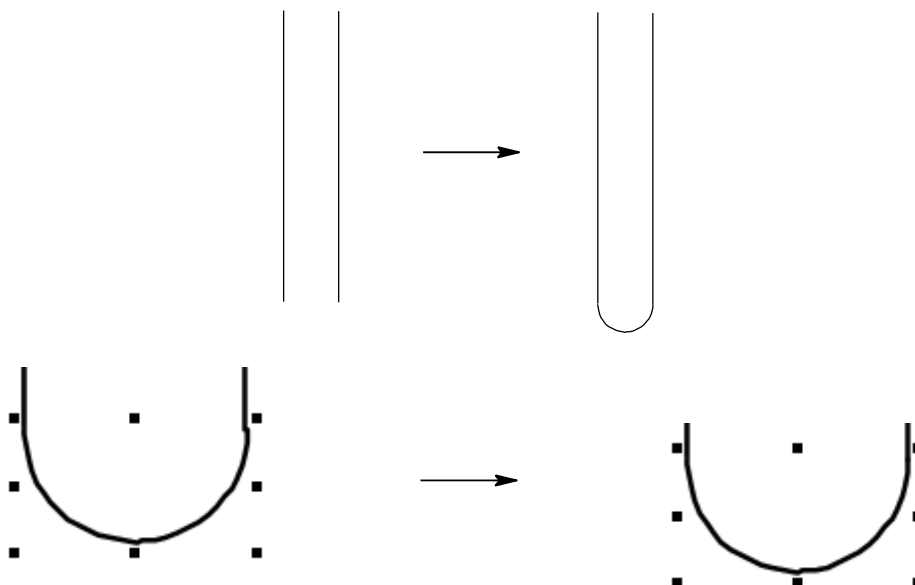
můžete také použít ikonu **Delete**  z **hlavní lišty**).





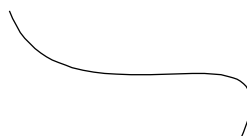
3. Kliknutím na ikonu **Arc**  (**Oblouček**) vyberte oblouček, který je označen jako **Arc 180°**




a kliknutím a tažením myši spojte oba dolní konce rovnoběžných čar (doporučujeme si je přiblížit). Pokud se Vám nepodaří napojit přímo na čáry, označte oblouček pomocí **Šipky** a **tažením** za některý z **bodů** upravte jeho **velikost**, případně oblouček posuňte.

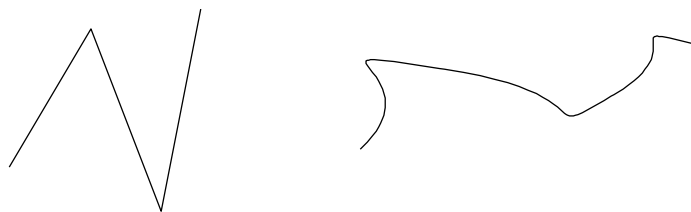


4. Možná jste již poznali, že kreslíte **zkumavku**. Vytvořený obrázek zatím nemažte, později jej dokončíte. Nejdříve si však ukážeme ostatní čáry a křivky. Ikona **Curve**  (Křivka) umožňuje nejprve nakreslit esovitou křivku, jejíž vlastnosti můžete dále měnit (úpravou krajních bodů nebo také pomocí ikony **Edit Nodes**  (**Úprava uzlů** objektu).








5. Poslední ikonou v této skupině je **Polyline**  (**Více spojených čar**). Opakovaným klikáním na různá místa pracovního prostoru se postupně vykresluje **lomená čára** (ostrý úhel mezi čarami). Klikáním a tažením myši se vykreslují vzájemně napojené **zaoblené křivky**. Její kreslení **ukončíme dvojklikem levým** tlačítkem myši při kresbě posledního bodu, nebo až po jeho





nakreslení **kliknutím pravým** tlačítkem myši či **klávesou Esc**. I na objekty typu Polyline lze použít **Úpravu uzlů**.





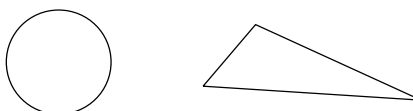
## b) Kreslení šipek

1. Pomocí ikony **Arrow**  (**Kreslení šipky**), umístěné také v **liště pro kreslení**, můžete kreslit rovné šipky (podobně jako při použití ikony **Reaction Arrow**  v režimu **Structure**). Dvojitým kliknutím na šipku můžete **měnit její vlastnosti** (čáry a hrotu zvlášť).
2. Vyberete-li pomocí **Šipky**  **Arc**  (např. Arc 120°) a následně vyberete ikonu **Arrow** , můžete kreslit zahnuté šipky, což se hodí zejména pro reakční mechanismy v organické chemii.

## c) Kreslení tvarů

1. Pomocí ikon v další skupině **lišty pro kreslení** můžete kliknutím a tažením myši kreslit nejrůznější **tvary**: **Rectangle**  (**Obdélník**), **Rounded Rectangle**  (**Zaoblený obdélník**), **Ellipse**  (**Elipsa**) a **Polygon**  (**Mnohoúhelník**). Obdélník a zaoblený obdélník:
 



2. Držíte-li při kreslení **elipsy** klávesu **Shift**, vykreslí se Vám **kruh**. Kreslení mnohoúhelníku zakončíte stejně, jako kreslení lomené čáry (**dvojklikem levým** tlačítkem myši při kresbě posledního bodu, nebo až po jeho nakreslení **kliknutím pravým** tlačítkem myši či **klávesou Esc**).



3. Pomocí **Šipky** vyberte libovolný **tvar** (např. zaoblený obdélník) a dvojklikem změníte **nastavení** jeho obrysové čáry (**Pen**) – styl, šířku a barvu, jeho výplň (**Fill**) či Stín (**Shadow**):



. Analogicky jako nastavení obrysové čáry můžete měnit **vlastnosti křivek**.

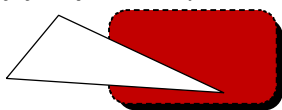
## d) Otáčení, Změna pořadí, seskupování a Zarovnání objektu

1. Libovolný objekt vybraný pomocí **Šipky** můžete překlápět či otáčet pomocí následujících ikon:



2. Ikona **Select/Move/Rotate** (**Výběr, pohyb a otočení** objektu) umožňuje otočení objektu o libovolný úhel.

3. Umístíte-li dva objekty tak, že se překrývají, např. , můžete měnit jejich **pořadí**. Vybráním trojúhelníku a ikony **Bring to Front** (**Přenést objekt do popředí**):



Trojúhelník byste také mohli vrátit zpět pomocí ikony **Send to Back** (**Přenést objekt do pozadí**).

4. S oběma objekty také můžete pracovat jako s jedním, např. je společně přesouvat. Stačí je vybrat Šipkou a aktivovat ikonu **Group** (**Seskupit/Rozdělit objekty**). Opětovným kliknutím na tutéž ikonu objekty znovu rozdělíte.

5. Pomocí ikon **Align** (**Zarovnání vybraných objektů**) můžete vybrané

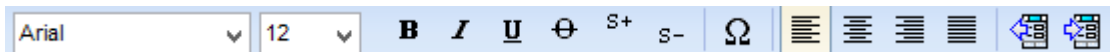
objekty různě zarovnávat – např. k levému okraji: . (**Align Bottom** je další možností, jak k sobě srovnat dvě čáry – stěny kreslené zkumavky.)

## e) Vkládání textu a popisků a jejich editace

1. ChemSketch nabízí dva módy pro vkládání textu: **Text** (**Formátovaný text**) a **Artistic**

**Text** (**Umělecký text**). Na rozdíl od Formátovaného textu může být s **Uměleckým textem** pracováno jako s jakýmkoli jiným **objektem** (zvětšování, otáčení apod.)

2. Pokud chceme již jednou vytvořený text libovolně upravit, stačí použít ikonu **Edit Text** (**Upravit text**) v liště **Draw**. Vedle ikony se zobrazí panel nástrojů umožňující úpravu textu:



. Pokud s ikonou **Edit Text** kliknete do volného prostoru, můžete rovnou vložit formátovaný text.

Obdélník




Obdélník

Obdélník



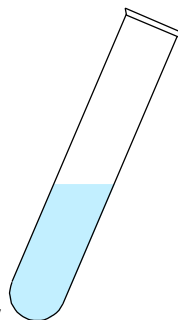
Obdélník

## f) Vložení obrázku

1. Obrázek (např. **fretka-s-filtraci.jpg**) vložíte jednoduše pomocí ikony **Insert Image**  (Vložit obrázek).




### Úkol 2



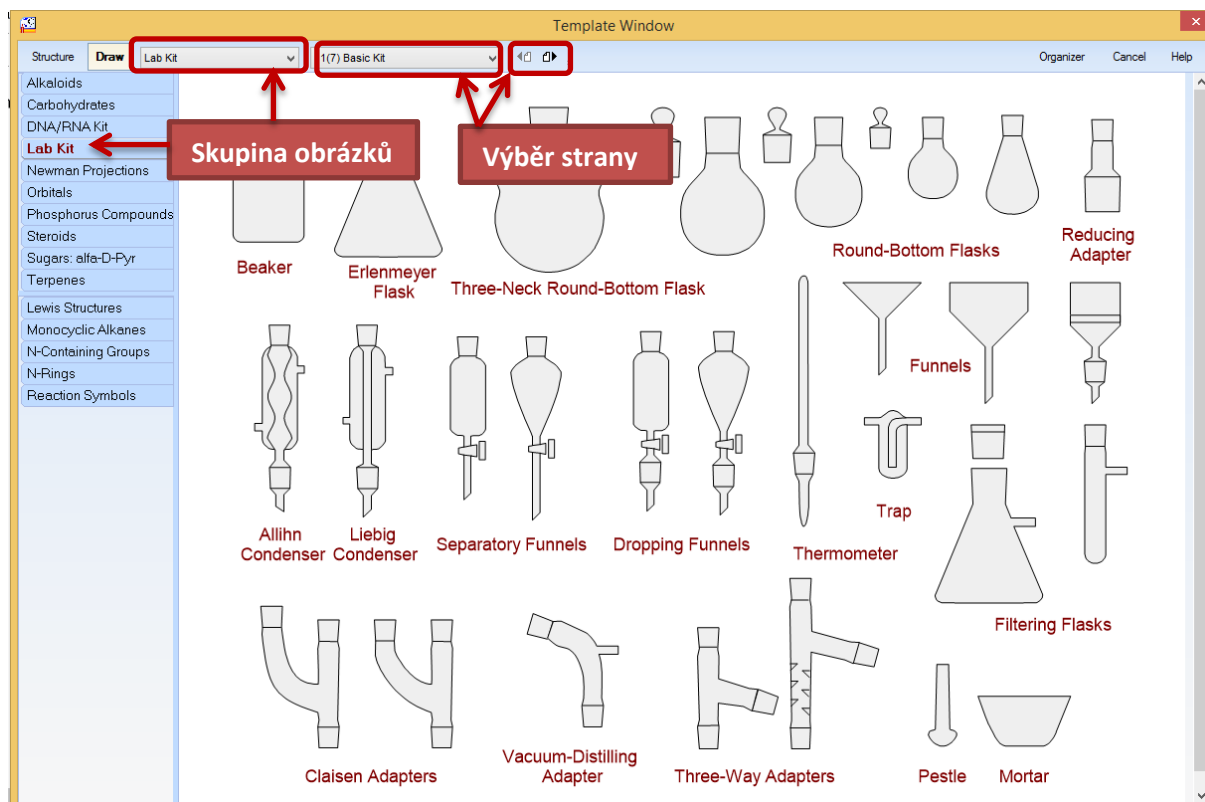
Dokreslete rozkreslenou zkumavku do následující podoby

<sup>6</sup>

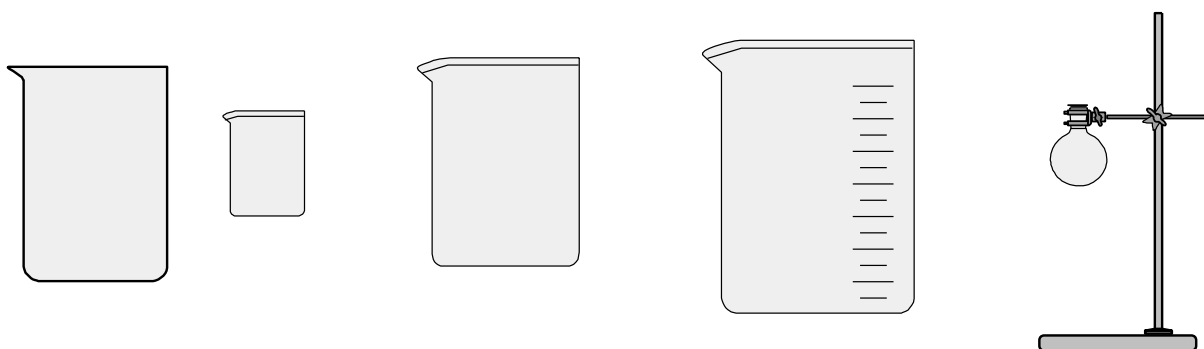
## g) Kreslení chemických aparatur

1. Použijte ikonu **Open Template Window (Otevřít Okno Šablon)**  v hlavní liště (nebo stiskněte klávesu **F5**) a vyberte si skupinu **Lab Kit (Laboratorní pomůcky)**.

<sup>6</sup> Nejprve pomocí ikony **Polygon** dokreslete **horní část** zkumavky. Dále pomocí stejného nástroje nakreslete **obrys kapaliny** (zkumavku co nejvíce zvětšete, můžete se snažit vytvářet oblé tvary pomocí tažení myši – stejně jako u **Polyline**). Dvojím kliknutím na kapalinu upravte její vlastnosti (**Pen: Style – None, Fill: Color – vyberte některou z modrých barev**) a přeneste kapalinu do pozadí (ikona **Send to Back**), aby byl vidět obrys zkumavky. Na závěr vytvořte ze zkumavky jeden objekt (ikona **Group**).

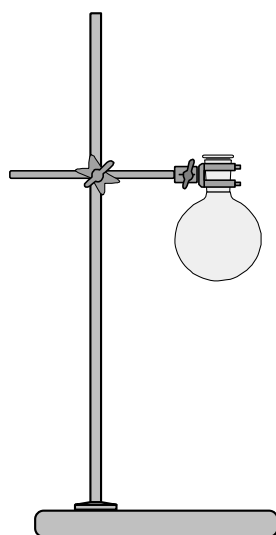


2. Projděte si jednotlivé stránky a zkuste vložit do dokumentu kádinku (**Beaker**) a aparaturu označenou jako **Clamp** (Stojan s držákem a baňkou s kulatým dnem). Připomínáme, že obrázek vyberete kliknutím a dalším kliknutím jej umístíme do pracovního prostoru (automaticky budete přepnuti z režimu Structure do režimu **Draw**). Kádinku naleznete na 1. i 7. straně, proto jste mohli vložit několik variant. Zkuste **změnit velikost** aparatury, aby výška odpovídala přibližně největší kádince a **překlopit ji** podél pomyslné **vertikální** osy.

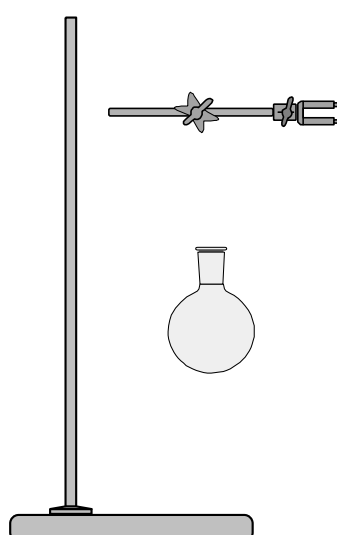


3. Nyní vložte znovu aparaturu **Clamp** (**Obr. 1**) a aplikujte na ni ikonu **Group** – tím celou aparaturu rozdělíte na jednotlivé objekty: **stojan**, **držák** a **baňku**. Tím získáte např. **samostatný držák**, který **jinde v šablonách nenajdete** či jiné užitečné objekty, které můžete dále upravovat (**Obr. 2**). **Objekty** vzniklé spojením více objektů můžete pomocí ikony **Group** dále rozdělovat.

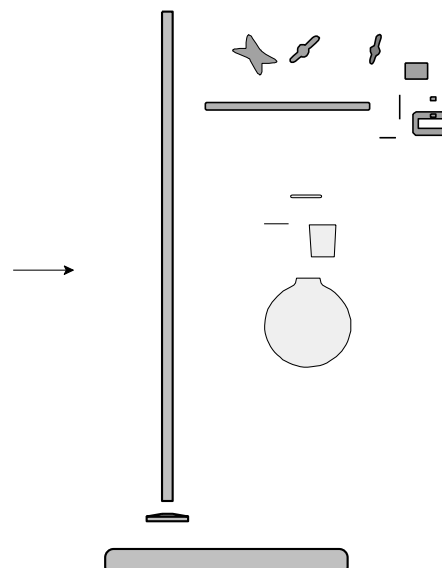




Obr. 1

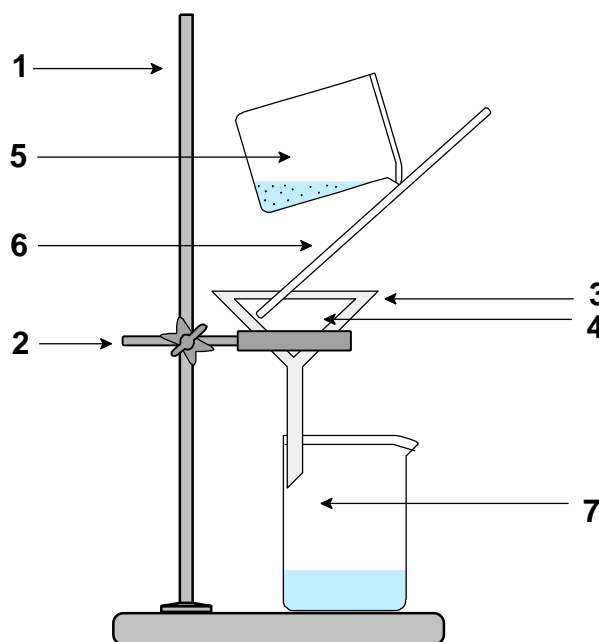


Obr. 2



### Úkol 3

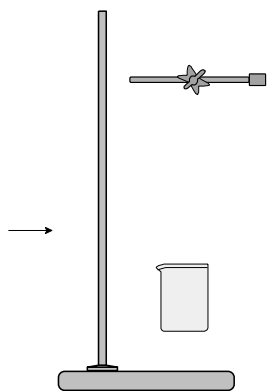
Nakreslete následující filtrační aparaturu jako na následujícím obrázku.



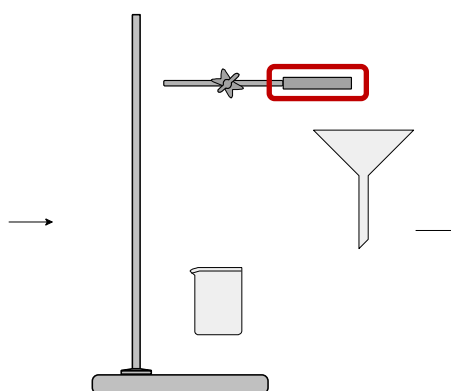
- 1 ... laboratorní stojan
- 2 ... filtrační kruh
- 3 ... filtrační nálevka
- 4 ... filtrační papír
- 5 ... kádinka s **filtrační směsí**
- 6 ... skleněná tyčinka
- 7 ... kádinka s **filtrátem**

#### Navrhovaný postup:

- Nejprve pomocí ikony **Open Template Window (Otevřít Okno šablon)** a skupiny **Lab Kit** vložte aparaturu **Clamp** ze str. 7 (**Obr. 1**).
- Pomocí ikony **Group** ji rozdělte na jednotlivé objekty: **stojan**, **držák** a **baňku** (**Obr. 2**).
- Baňku** můžete **smazat**. Ze **svorky** na držáku nechte pouze obdélníkovou část, kterou využijete jako **filtrační kruh**. Dále si přichystejte ostatní potřebné objekty (pomocí **Open Template Window** vložte kádinku (**Beakers**, str. 7) a **filtrační nálevku** (**Funnel**, str. 6) - **Obr. 3**.

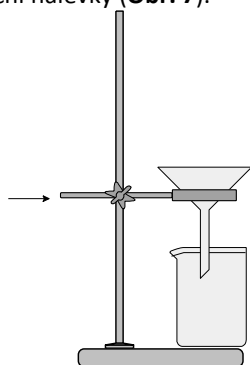


Obr. 3

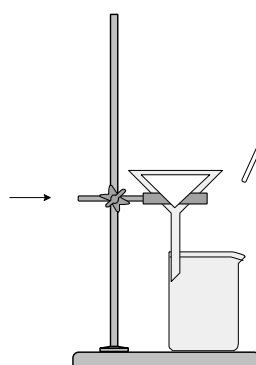


Obr. 4

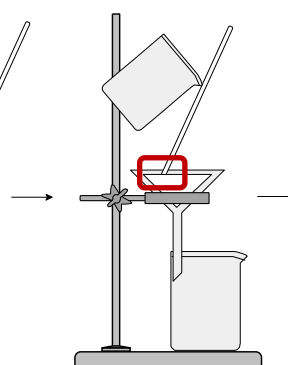
- Změňte vhodně **velikost objektů** a **uspořádejte je**:
  - **rozšiřte filtrační kruh**, aby se do něj vešla filtrační nálevka (**Obr. 4**);
  - **sjednoťte filtrační kruh s držákem**, **vložte** do něj **filtrační nálevku**, kterou **přesuňte do pozadí** a **přesuňte oba objekty na stojan**; dále **upravte velikost kádinky**; **přesuňte filtrační kruh s nálevkou do kádinky**, a pokud není vidět stopka filtrační nálevky, **přesuňte kádinku do pozadí** (**Obr. 5**);
  - **kádinku** dále **překlopte** podél pomyslné vertikální osy a **posuňte** ji tak, aby se stopka filtračního kruhu dotýkala její stěny; dále můžete pouze **zvětšit** spodní část **stojanu**, aby kádinka nestála ve vzduchu, nebo navíc i **zmenšit velikost tyčky** u filtračního kruhu a posunout k ní filtrační kruh s nálevkou.
- Pomocí **Rounded Rectangle** nakreslete **skleněnou tyčinku** a **filtrační papír** do aparatury (**Obr. 6**).
- Přeneste filtrační kruh **do popředí**, **vložte další kádinku** a vhodně ji **zmenšete/zvětšete** a **natočte**, aby pomyslná **kapalina stékala po skleněné tyčince**; následně **přesuňte tyčinku** s novou kádinkou do filtrační nálevky (**Obr. 7**).



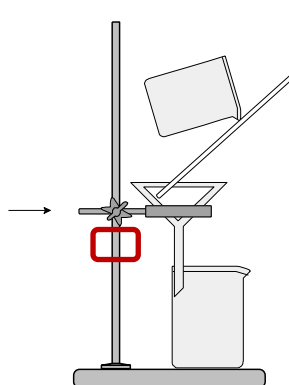
Obr. 5



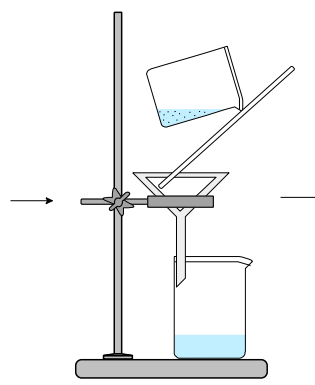
Obr. 6



Obr. 7

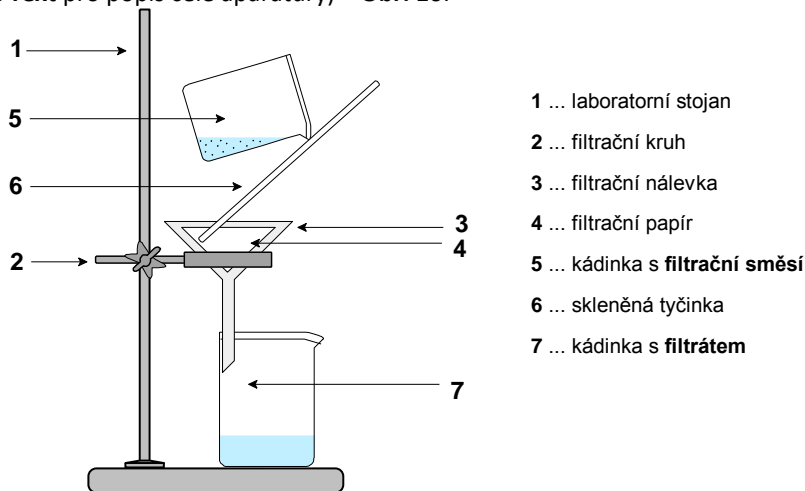


Obr. 8



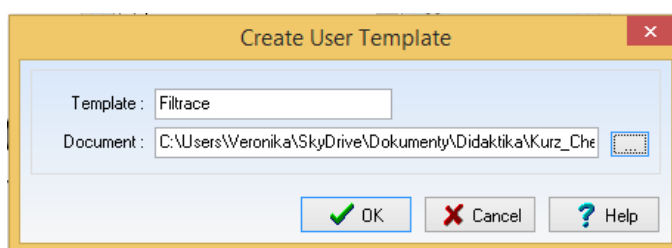
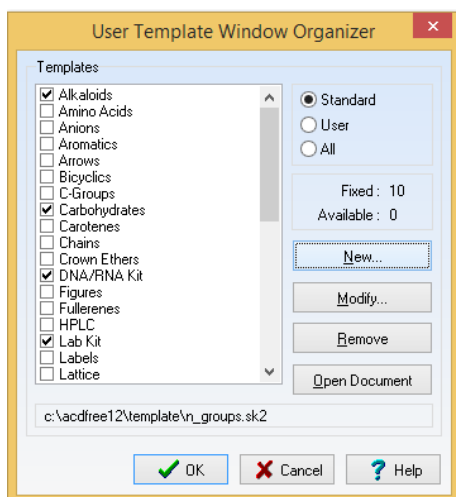
Obr. 9

- Pokud **kádinka** zasahuje do stojanu, **vyberte** ji (pomocí klávesy **Shift**) **společně se** skleněnou **tyčinkou**, **otočte** je a **posuňte**; přeneste **tyčinku do popředí**, aby bylo vidět, že se dotýká filtračního papíru (**Obr. 8**).
- Na závěr nakreslete do horní kádinky **směs určenou k filtraci (kapalnou složku analogicky jako v Úkolu 2 + je potřeba zrušit bílou výplň kádinky a pevnou složku můžete vložit jako tečky – černé kruhy, které rozkopírujete)**. Vložte také kapalinu do dolní kádinky (**Obr. 9**) – opět je třeba vymazat výplň kádinky.
- Nyní zbývá vložit popisy jednotlivých částí aparatury (pomocí **šipek**, ikony **Text** pro čísla u šipek a ikony **Artistic Text** pro popis celé aparatury) – **Obr. 10**:



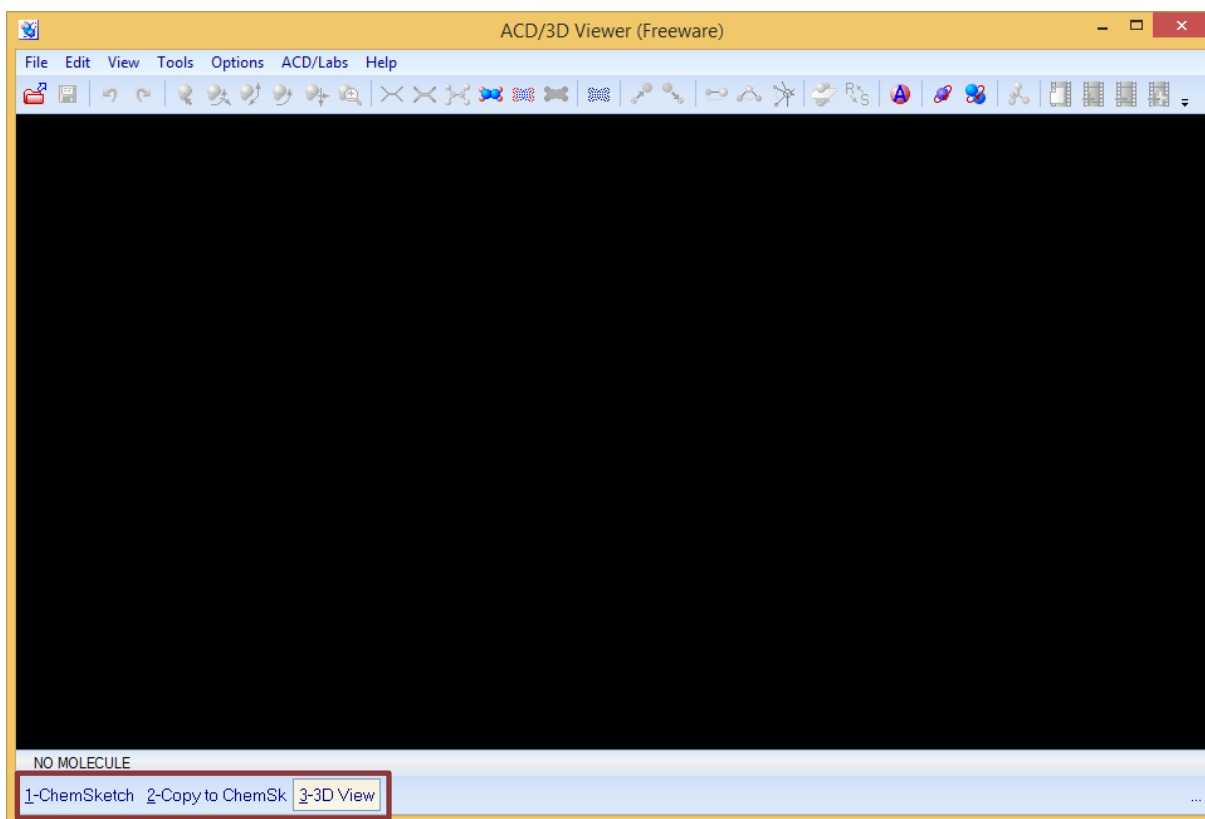
Obr. 10

- **Tip:** pokud chcete vytvořenou aparaturu **vložit do Okna Šablon (Open Template Window)**, abyste ji mohli použít i po zavření souboru, uložte ji jako **Filtrace\_s\_popisem.sk2** (po vložení na první stránku prázdného dokumentu slučte všechny objekty aparatury a uložte).
  - Otevřete **Template Window** a zvolte **Organizer** v pravém horním rohu.
  - Následně klikněte na **New**, napište **název** nové skupiny (**Filtrace**) a vyberte příslušný **soubor**.
  - Uložte volbu kliknutím na obě tlačítka **OK**.
  - Následně zkuste **vložit filtrační aparaturu** pomocí **Okna Šablon** do svého dokumentu. Tím, že jste objekty filtrační aparatury sloučili, je budete moci vkládat jako jeden celek, druhý celek budou tvořit popisky.



## 8) 3D Viewer

Aplikace 3D Viewer slouží k vizualizaci chemických struktur v 3D prostoru. Otevřete ji z nabídky **Start** → **Všechny programy** → **ACD/Labs 12.0** a potom zvolte **ChemSketch**. Přejděte, vykopírujte ... V Menu ACD.



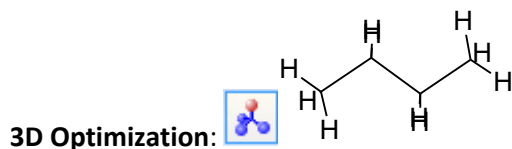
Obrázek 5: Pracovní prostředí aplikace 3D Viewer


V levém dolním rohu se nachází **tlačítka**, která umožní přechod mezi aplikacemi ChemSketch a 3D Viewer.

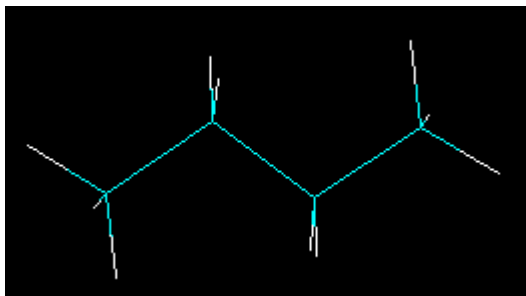
1. Pomocí **1.** tlačítka **ChemSketch** přejděte do programu ChemSketch (pomocí **3.** tlačítka **3D View** byste se mohli vrátit zpět do 3D Vieweru).
2. V režimu **Structure** nakreslete pomocí **Draw Normal** klikáním a tažením myši **butan**:



3. Vyberte nakreslenou strukturu a optimalizujte ji pro 3D vizualizaci pomocí tlačítka








4. Vyberte optimalizovanou strukturu a pomocí tlačítka **3D Viewer**  vpravo nahoře v **hlavní liště** překopírujte strukturu do **3D Viewru**. Měli byste dostat následující výsledek:



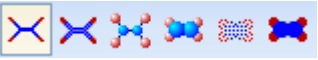

5. Pokud tlačítko 3D Viewru nevidíte nebo nechcete použít, je možné použít tlačítka vlevo dole: **2.** tlačítko **Copy to 3D** (překopírovat strukturu do 3D Viewru a přejít do této aplikace).


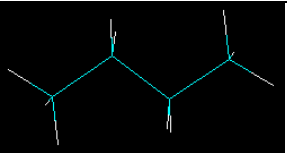

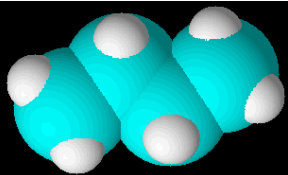

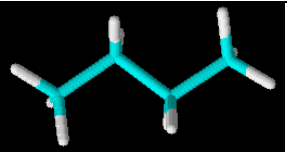

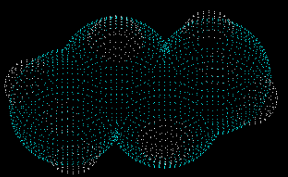

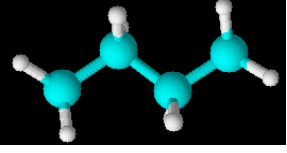

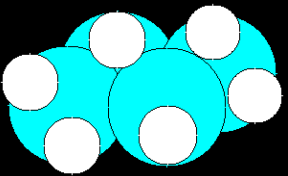
### a) Otáčení a posouvání struktury

1. Pomocí sady tlačítek

2.    . Prvním, defaultně vybraným tlačítkem **3D Rotate** , můžete kliknutím a tažením myši otáčet strukturu v prostoru. Podobně fungují i ostatní tlačítka. Tlačítko **Move**  slouží k přesunutí struktury.


### b) Typ modelu

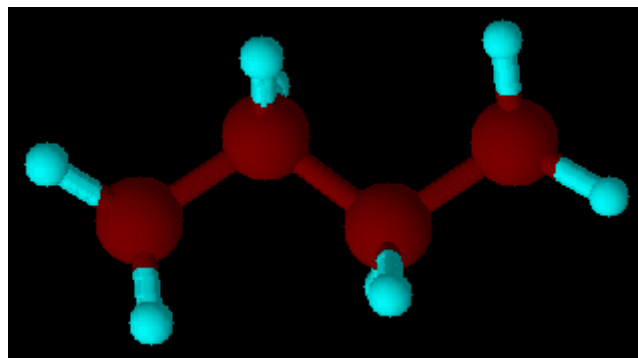
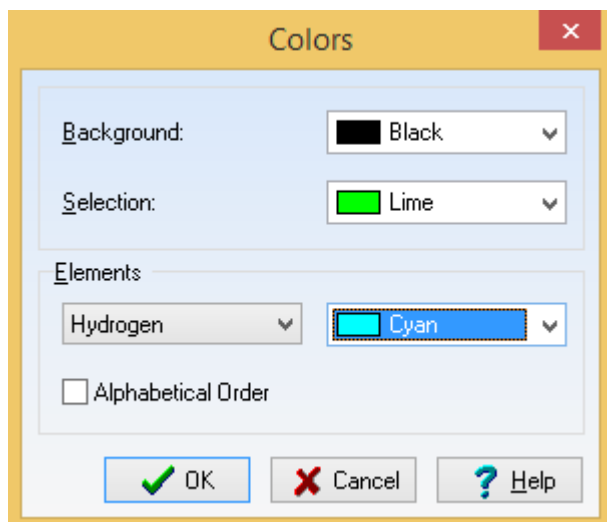
1. Pomocí další sady tlačítek  můžete změnit **typ modelu** zobrazované struktury z defaultně vybrané **Drátkovou kostru (Wireframe)**  na jiný.

|   |   |   |   |                           |   |
|---|---|---|---|---------------------------|---|
|  | <b>Drátkovou kostru (Wireframe)</b>                           |  |  | <b>Kaloty (Spacefill)</b> |  |
|  | <b>Tyčinky (Sticks)</b>                                       |  |  | <b>Tečky (Dots Only)</b>  |  |
|  | <b>Kuličky a tyčinky = kuličkový model (Balls and Sticks)</b> |  |  | <b>Disky (Disks)</b>      |  |



2. Tlačítko  **With Dots (S tečkami)** můžete kombinovat s předchozími typy modelů.

## c) Změna barvy





1. Vyberte **kuličkový** typ modelu (**Balls and Sticks**).
2. Pomocí tlačítka **Set Colors**  nastavte barvu vodíků (v dialogovém okně Colors u **Hydrogen** vyberte např. hodnotu **Cyan**) a uhlíků (u **Carbon** vyberte např. hodnotu **Maroon**). Lze zde také změnit barvu pozadí (**Background**) a barvu vybraných prvků (atomů či vazeb – pole **Selection**) Volbu potvrďte tlačítkem **OK**.



## d) Změna atomových poloměrů u kuličkových modelů

Pomocí tlačítka **Increase Atomic Radii**  (**Zvětšit atomový poloměr**) se zvětší atomové poloměry všech prvků v kuličkovém modelu o 5 %. Tlačítko lze použít opakovaně. Podobně funguje tlačítko **Decrease Atomic Radii**  (**Zmenšit atomový poloměr**).

## e) Výpočet parametrů struktury

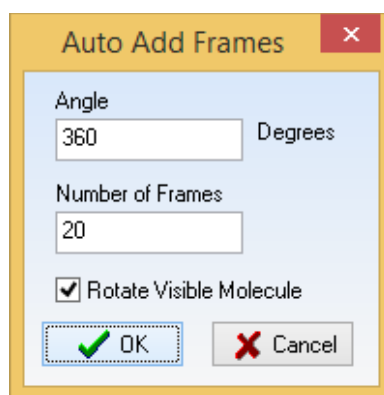
1. Pomocí tlačítka **Bond Length**  (**Délka vazby**) můžete vypočítat délku vazby mezi dvěma atomy. Po aktivaci uvedeného tlačítka se zároveň aktivuje tlačítko **Select Atoms**  pro výběr atomů (**vlevo** v nástrojové liště). Kliknutím vyberte dva sousední atomy, mezi nimiž chcete délku vazby spočítat (atomy se obarví nazeleno). Analogicky můžete spočítat i vzdálenost atomů, které spolu nesousedí.
2. Tlačítko **Angle**  (**Úhel**) slouží k výpočtu úhlu mezi dvěma vazbami. Pro výpočet je nutné vybrat 3 atomy tvořící úhel.
3. Tlačítko **Torsion Angle**  (**Torzní úhel**) slouží k výpočtu úhlu mezi rovinami tří vazeb.

## f) Automatické úpravy modelu

Tlačítka **Auto Rotate (Automatické otáčení)** a **Auto Rotate and Change Style (Automatické otáčení a změna typu modelu)** slouží k automaticky prováděným změnám modelu.

## g) Uložení modelu

1. Vytvořený model si můžete uložit pro další použití volbou v Menu: File → **Save As....** Formát modelů je **.s3d**.
2. Můžete také ukládat jako obrázek (**.gif**, **.bmp**).
3. Ještě před ukládáním si můžete z modelu vytvořit **animaci**. Klikněte na tlačítko **Auto Add Frames (Automatické přidání snímků)** a nastavte **úhel otáčení modelu (Angle)** a **počet snímků (Number of Frames – délku animace)**. Můžete nechat vybrané **defaultní hodnoty** (úhel 360 ° a 20 snímků).



4. Nyní svoji volbu potvrďte tlačítkem **OK**. Následně uložte animaci jako **animovaný gif** (Animated GIF images, **.gif**). Vytvořenou animaci pak můžete vkládat do vlastních materiálů, např. webových stránek.

## Literatura

1. <http://www.acdlabs.com/>
2. [http://www.ft.tul.cz/depart/knt/nanotex/Program%20ACD\\_k%20%20cviceni%20TNA\\_vizualizace%20molekul.pdf](http://www.ft.tul.cz/depart/knt/nanotex/Program%20ACD_k%20%20cviceni%20TNA_vizualizace%20molekul.pdf)
3. [http://www.vsch.tz/lam/new/chemsk\\_t\\_v10\\_CZa.pdf](http://www.vsch.tz/lam/new/chemsk_t_v10_CZa.pdf)
4. [http://fch.upol.cz/skripta/labt/chemsketch\\_kfc.pdf](http://fch.upol.cz/skripta/labt/chemsketch_kfc.pdf)
5. [www.kvic.cz/apps/ICeMSK/GetFile.aspx?src=Poradna&ID=83](http://www.kvic.cz/apps/ICeMSK/GetFile.aspx?src=Poradna&ID=83)



Návod pro práci s programem ACD/ChemSketch

Verze 12, Free

Veronika Švandová, 2014

Tento dokument je publikován pod licencí [Creative Commons Uveďte autora-Neužívejte dílo komerčně-Zachovejte licenci 3.0 Česká republika \(CC BY-NC-SA 3.0 CZ\)](#).