

## ChemDraw

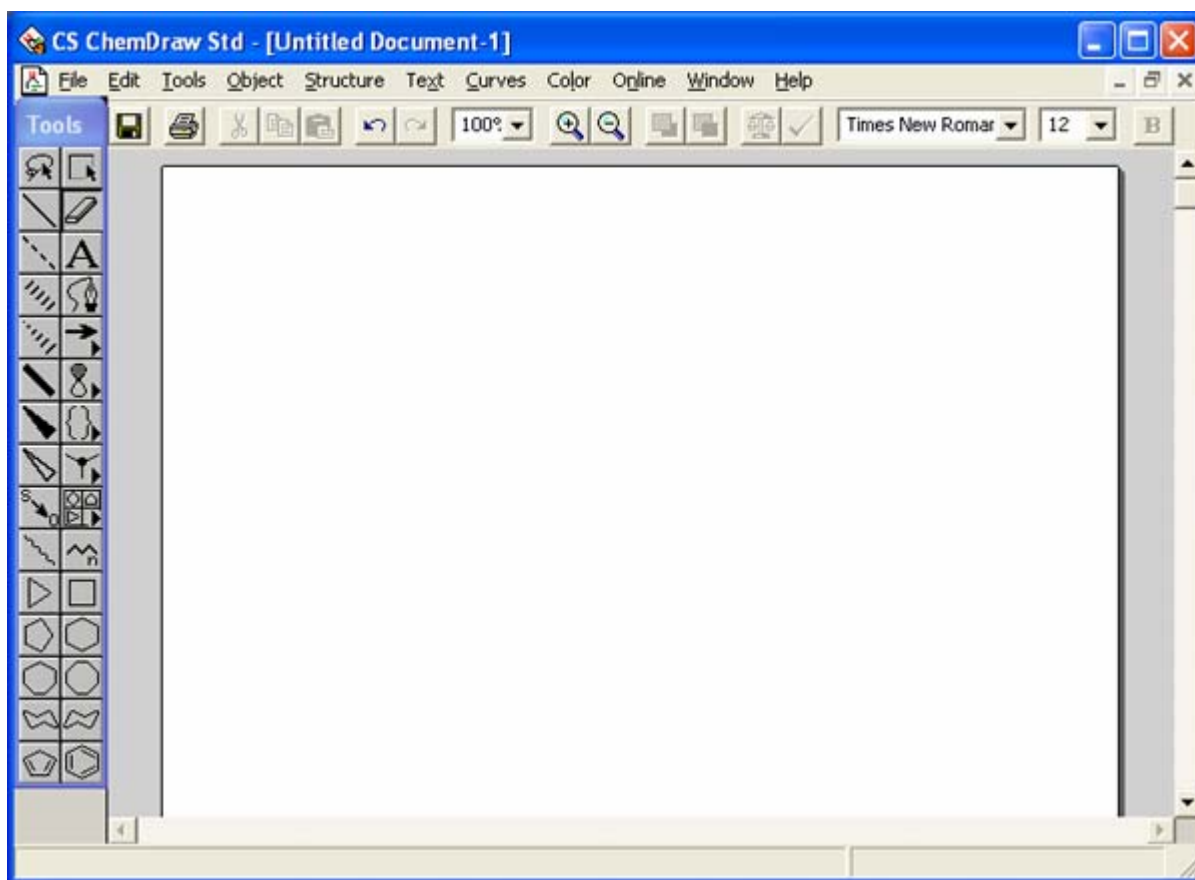
ChemDraw on maailman eniten käytetty kaupallinen kemian piirto-ohjelma, jolla voidaan piirtää mm. kemiallisia rakenteita ja reaktioita. Ohjelma on helppokäyttöinen ja se tarjoaa useita käyttökelpoisia työkaluja. Piirtämisen lisäksi ohjelmalla voidaan määrittää mm. yhdisteen molekyylipaino tai molekyylikaava.

Maksullisen ohjelman voi asentaa omalle koneelleen osoitteesta <http://www.cambridgesoft.com/>.

Tässä ohjeessa annetaan vain yksinkertaisia ohjeita peruskäyttäjälle. Tarkempia ohjeita löytyy ohjelman omasta **Help** -valikosta.

## Työpöytä

Kun ChemDraw -ohjelma käynnistetään, avautuu valkoinen sivu, jonka vasemmalta puolelta löytyy rakenteiden ja reaktioiden piirtämiseen tarvittavat työkalut. Ylävalikko sisältää sivun muokkaamiseen tarvittavien työkalujen lisäksi työkaluja kuvien järjestämiseen, skaalaamiseen ja rakenteen analysointiin.



Kuva 1. ChemDraw (tässä versio 6.0) työpöytä

Ohjelmalla piirretyt kuvat voidaan siirtää tekstitiedostoihin Copy-Paste menetelmällä tai tallentamalla kuva ja lisäämällä tallennettu tiedosto tekstitiedostoon.

## Päävalikko

Ylävalikon **File** -valikosta löytyvät työkalut sivun tallentamiseen, tulostamiseen sekä asetusten muuttamiseen. **Apply Settings** -komennolla voidaan tiedostolle valita jonkin lehden käyttämät asetukset. Opinnäytetöissä on suositeltavaa käyttää ACS Document -asetusta.

## Tools ja Object -valikot

**Tools** -valikko sisältää työkaluja, joilla sivun taustaksi saadaan rakenteiden asettelua helpottavia ristikoita ja joilla voidaan pienentää tai suurentaa sivua. **Object** -valikosta puolestaan löytyvät työkalut valitun rakenteen suurentamiseen ja pienentämiseen (scale), kääntämiseen (rotate, flip horizontal, flip vertical) ja rakenteiden keskinäiseen järjestämiseen (align, group, ungroup).

## Structure -valikko

**Structure** -valikosta löytyvät tarvittavat työkalut esimerkiksi valitun molekyylin sisältämien atomien (atom properties) ja sidosten (bond properties) määrittelyyn. Rakenteelle voidaan laskea molekyyliä ja sen ominaisuuksia voidaan arvioida valikosta löytyvän **analyze structure** -komennon avulla. Tästä valikosta löytyvät myös työkalut rakenteen oikeellisuuden tarkistamiseen (check structure).

## Text, Curves ja Color -valikko

Nämä valikot sisältävät työkalut, joilla voidaan muuttaa tekstin ja piirrettyjen kaarien ominaisuuksia ja värejä.

## Piirtotyökalut

Vasemmalla olevasta valikosta löytyvät piirtämiseen tarvittavat työkalut. Tässä esitellään joitakin peruskäyttäjälle tarpeellisia työkaluja. Lisää tietoa löytyy ohjelman omasta **Help** -valikosta.



**Select** -toiminolla valitaan aktiiviseksi haluttu rakenne tai reaktio. Ohjelmassa on kaksi erilaista select -toimintoa, **lasso** sekä **marquee**.

Kun **Lasso** -toiminto on klikattu aktiiviseksi, voidaan lassota molekyyli painamalla vasemmanpuoleista hiiren näppäintä. Kun näppäin pidetään alhaalla, voidaan haluttu kohde ympyröidä. Kun kohde on ympyröity, vapautetaan hiiren vasemmanpuoleinen näppäin, jolloin rakenteen päälle ilmestyy käden kuva. Nyt rakennetta voidaan siirrellä ja sen kokoa voidaan muuttaa hiirellä, kun hiiren vasemmanpuoleinen näppäin painetaan uudelleen alas. Aktiivisen osan kokoa voidaan muuttaa vetämällä aktiivisen kappaleen kulmista.



**Marquee** -toiminto toimii vastaavalla tavalla, mutta valittava osa tulee suorakaiteen sisään. Molemmilla toiminnoilla voidaan valita myös yksittäisiä atomeja painamalla hiiren vasenta näppäintä halutun atomin kohdalla.



Sidoksia voidaan piirtää erilaisilla **bond** -toiminnoilla. Hiiren nuoli asetetaan siihen pisteeseen, josta sidoksen halutaan lähtevän ja painetaan vasenta näppäintä. Sidoksesta saadaan eripituinen pitämällä shift -näppäintä samanaikaisesti pohjassa. Kaksoissidos piirretään piirtämällä sama sidos kahteen kertaan. (Sidostyyppiä voidaan muuttaa myös Structure -valikosta)



**Erase** -toiminnolla voidaan poistaa yksittäisiä sidoksia tai atomeja. Alueita voidaan poistaa myös valitsemalla Select -toiminnalla haluttu alue aktiiviseksi ja painamalla sen jälkeen Delete -näppäintä näppäimistöltä.



**Pen** -toiminnolla voidaan piirtää erilaisia kaarevia muotoja ja viivoja, joita ei saada piirrettyä muilla työkaluilla. Työkalulla on kaksi toimintatapaa. Työkalulla piirretään kaaria ja muotoja painamalla hiiren vasenta näppäintä halutussa alkupisteessä ja halutussa loppupisteessä. Piirrettyjä kaaria voidaan muokata painamalla Esc -näppäintä tai pen -kuvaketta.



**Arrow** -toiminto sisältää erilaisia nuolia, joita tarvitaan reaktioyhtälöiden piirtämiseen. Erilaiset nuolet saadaan näkyviin pitämällä hiiren vasenta painiketta pohjassa nuoli -kuvakkeen kohdalla.



**Orbital** -toiminto sisältää orbitaaleja.



**Drawing elements** -toiminto sisältää erilaisia piirrustuselementtejä, kuten sulkeita, neliöitä ja ympyröitä.



**Chemical elements** -toiminnon avulla saadaan rakenteisiin merkittyä varauksia, elektroneja ja elektronipareja.



**Arcs** -toiminnolla saadaan piirrettyä erilaisia kaaria.



**Templates** -toiminto sisältää erilaisia kirjastoja, joista löytyy valmiina mm. erilaisia rengasrakenteita, heterosyklisiä yhdisteitä, aminohappoja ja sokereita.