

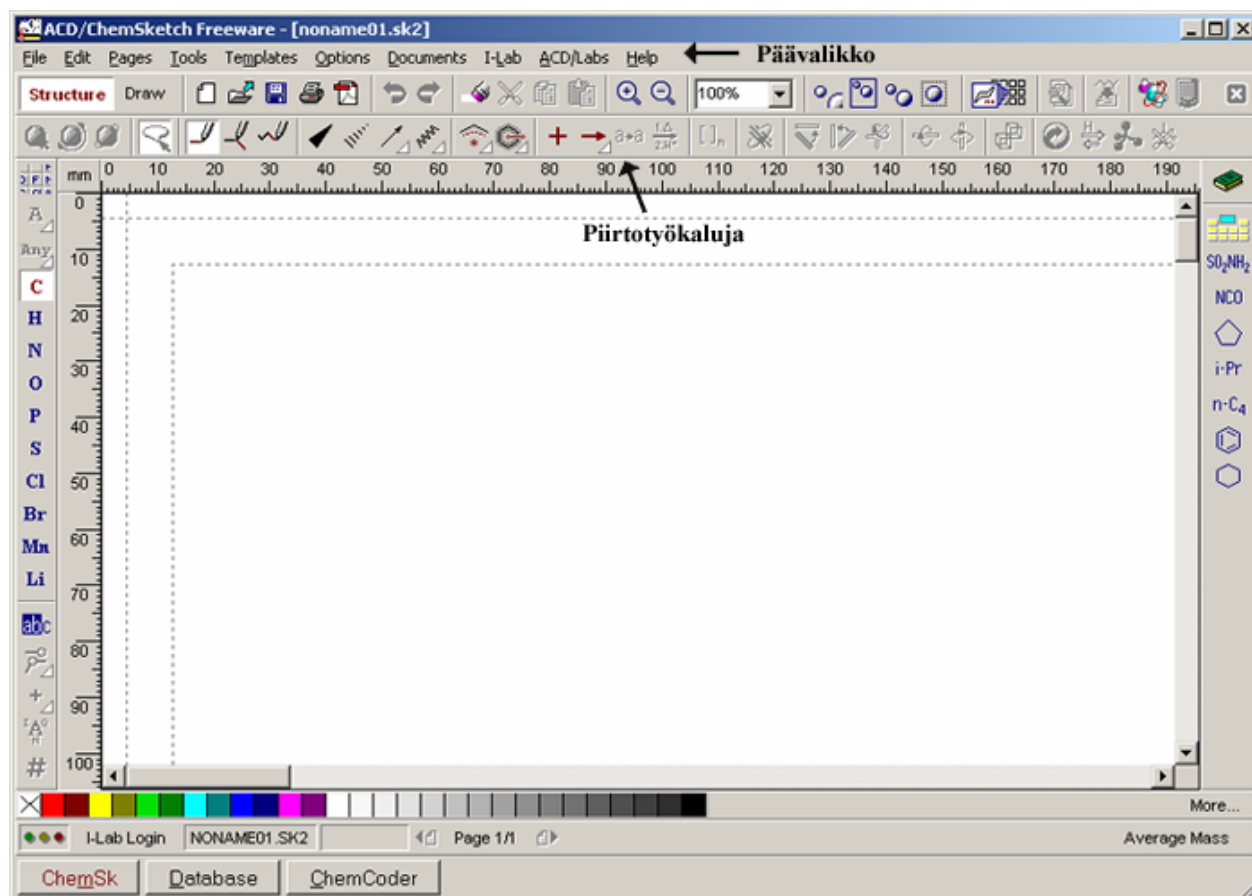
ACD/ChemSketch (Windows versio 8.0)

ChemSketch on monipuolinen kemian piirto-ohjelma, jolla voidaan piirtää kemiallisia rakenteita ja reaktioyhtälöitä. Lisäksi ohjelmassa on lukuisia muita käyttökelpoisia ominaisuuksia. Ohjelmalla voidaan laskea piirretyn molekyylin molekyyllipaino, määrittää molekyylin molekyylikaava, löytää yhdisteen tautomeerit, nimetä yksinkertaisia rakenteita, jne.. Tarvittaessa piirretyt kuvat voidaan kopioida esimerkiksi tekstinkäsittelyohjelmaan. Ohjelmapaketissa on mukana myös 3D Viewer, jolla voi kolmiulotteisesti visualisoida piirtämiään molekyyliä. Lisäksi ohjelmapaketissa on C NMR ja H NMR Viewer NMR-spektrien tutkimiseen.

Ohjelmasta löytyy vain Windows versio. Ohjelman voi asentaa ilmaiseksi omalle koneelle osoitteesta <http://www.acdlabs.com/download/>. Ohjelmasta on myös maksullinen versio, jossa on joitain lisäominaisuuksia ilmaisversioon verrattuna.

ChemSketch -ohjelman työpöytä

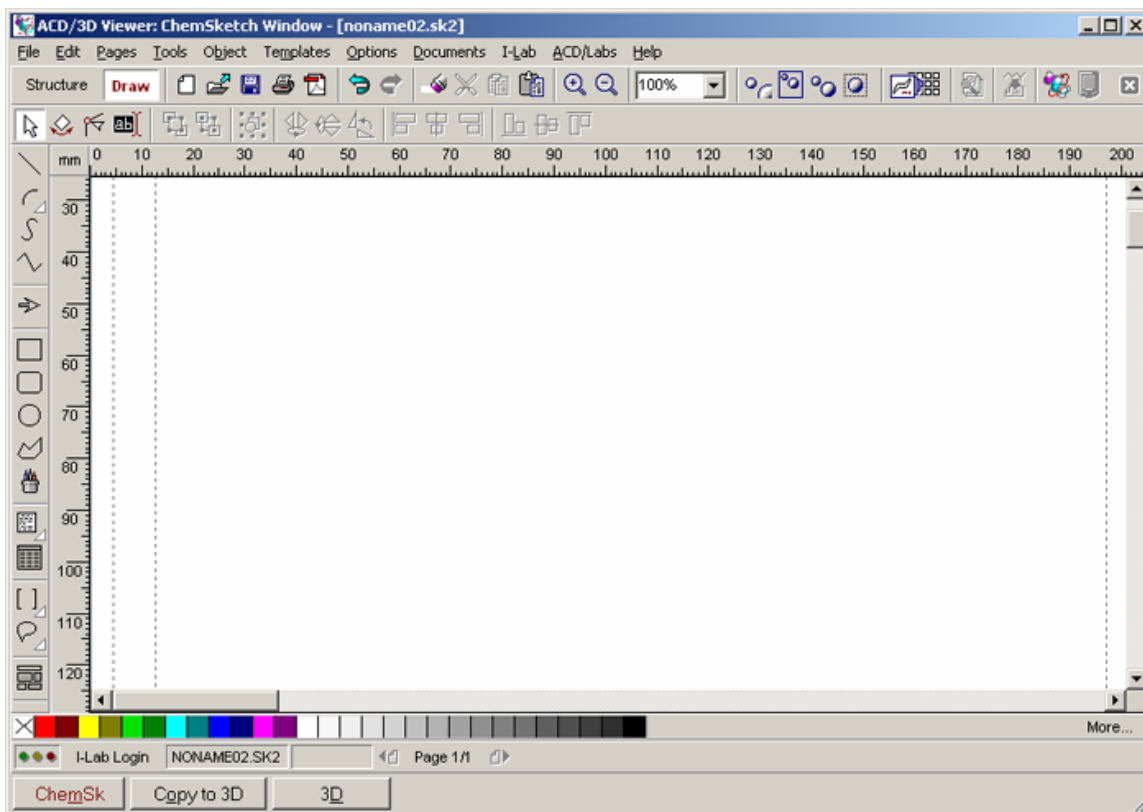
Kun ChemSketch -ohjelma käynnistetään, avautuu valkoinen sivu, jonka ylälaidassa ja vasemmalla puolella on erilaisia työkaluja (kuva 1). Tämä työpöytä on tarkoitettu lähinnä molekyyliarakenteiden piirtämiseen.



Kuva 1. ChemSketch -ohjelman työpöytä molekyyliarakenteiden piirtämiseen.

Structure Draw Ohjelmaikkunan näkymää voidaan vaihtaa **Draw** -toiminolla. Takaisin molekyyli rakenteiden piirtämiseksi voidaan klikkaamalla **Structure** -painiketta.

Molekyylien ja reaktioiden kirjoittamisessa kannattaa käyttää Structure -työpöytää, mutta muussa piirtämisessä Draw -työpöytää. Draw -työpöydällä löytyy työkaluja mm. taulukoiden tekemiseen ja kirjoittamiseen.



Kuva 2. ChemSketch -ohjelman työpöytä piirtämiseen.

Päävalikko

Päävalikosta löytyviin ominaisuuksiin kannattaa tutustua itsenäisesti. Tässä esitellään vain muutamia toimintoja.

File -valikosta löytyvät työkalut mm. sivun tallentamiseen ja tulostamiseen.

Pages -valikosta pääset muuttamaan mm. sivun taustaväriä ja otsikkoasetuksia.

Tools -valikko sisältää piirtämiseen tarvittavia työkaluja.

Template -valikosta pääset käyttämään templaattikirjastoja, joihin on koottu valmiita rakenteita. Voit myös itse tallentaa omia rakenteita templaateiksi.

Options -valikko sisältää työkaluja, joilla sivun taustaksi saadaan rakenteiden asettelua helpottavia ristikoita. **Set Structure Drawing Style** -komennolla voit valita tiedostolle jonkin lehden käyttämät asetukset.

Piirtotyökalut molekyyliarakenteiden piirtämiseen

Piirtämiseen tarvittavia työkaluja löytyy sekä vasemmassa sivussa että ylhäällä olevista työkalupalkeista. Piirtotyökalut valitaan aktiiviseksi klikkaamalla halutun työkalun kuvaketta. Kuvakkeet, joiden alareunassa on pieni kolmio, omaavat useamman toiminnon. Tällöin muut toiminnot saadaan aktiiviseksi klikkaamalla haluttua kuvaketta, siirtämällä hiirtä oikealle ja klikkaamalla hiiren vasemmanpuoleista painiketta halutun toiminnon kohdalla.

Seuraavassa on lyhyesti esitelty useimmat käytettävissä olevista piirtotyökaluista. Tässä ohjeessa annetaan yksinkertaisia ohjeita peruskäyttäjälle. Tarkempia ohjeita löytyy ohjelman omasta Help -valikosta.



Undo Draw ja Redo Draw -toiminnoilla voidaan liikkua piirtohistoriassa taaksepäin ja eteenpäin.



Delete -toiminnolla voidaan poistaa yksittäisiä sidoksia tai suurempia alueita. Kun toiminto valitaan aktiiviseksi klikkaamalla kuvaketta, muuttuu hiiren kursori isommaksi nuoleksi, jossa lukee DEL. Tällöin sillä voidaan poistaa haluttuja alueita klikkaamalla hiiren vasenta painiketta poistettavan alueen päällä.



Actual Size, Full Page, Fit All, Fit Selected -toiminnoilla voidaan muuttaa piirrettävän sivun kokoa tai valitun alueen kokoa.



Template Window -toimintoa klikatessa aukeaa templaattisivu, josta löytyy erilaisia kirjastoja. Niihin on koottu valmiita rakenteita (mm. erilaisia rengasrakenteita, heterosyklisiä yhdisteitä, aminohappoja, sokereita), kuvia laboratoriovälineistä ja -laitteista, orbitaaleja ja varoitusmerkkejä, joita voi hyödyntää piirtämisessä tai raporttien kirjoittamisessa.



Generate Name for Structure -toiminto antaa englanninkielisen nimen yhdisteelle. Toiminta toimii ainakin, kun nimetään yksinkertaisia rakenteita.



3D Viewer -toiminnolla voidaan tutkia piirretyn molekyylin 3-ulotteista rakennetta. Jäljempänä lisää toiminnon ominaisuuksista.



Select/Move -toiminnolla voidaan valita ja siirtää valittuja molekyyliä tai muita rakenteita.



Select/Rotate/Resize toiminnolla voidaan pyörittää molekyyliä tasossa, mutta sillä voidaan myös valita ja muuttaa valitun alueen kokoa.



3D Rotation -toiminnolla voidaan pyörittää molekyyliä 3-ulotteisesti.




Lasso -toiminnon ollessa aktiivinen, voidaan sillä lassota molekyyli painamalla vasemmanpuoleista hiiren näppäintä. Kun näppäin pidetään alhaalla, voidaan haluttu kohde ympyröidä, jolloin se muuttuu aktiiviseksi. Nyt hiiren vasen painike voidaan vapauttaa, ja kun hiiren kursori viedään lassotun rakenteen reunalle, tulee näkyviin ristikkäin olevat nuolet. Tällöin rakennetta voidaan siirrellä, kun hiiren vasemmanpuoleinen näppäin painetaan uudelleen alas.



Hiiliketjujen piirtämiseen on kolme erilaista työkalua. Kaksi ensimmäistä piirtää hiiliketjua hiili kerrallaan. Kolmas piirtää automaattisesti jatkuvaa hiiliketjua. Kaksois- tai kolmoissidoksen saa tehtyä kaikilla kolmella työkalulla, kun klikkaa haluttua kohtaa ketjusta kerran tai kahdesti riippuen siitä halutaanko kaksois- vai kolmoissidos.



Sidoksia ja niiden suuntautumisia voidaan kuvata erilaisilla bond -toiminnoilla. Hiiren nuoli asetetaan siihen pisteeseen, josta sidoksen halutaan lähtevän ja klikataan hiiren vasenta näppäintä. Toiminnoilla voidaan myös muuttaa olemassa olevien sidosten suuntautumisia klikkaamalla haluttua sidosta.

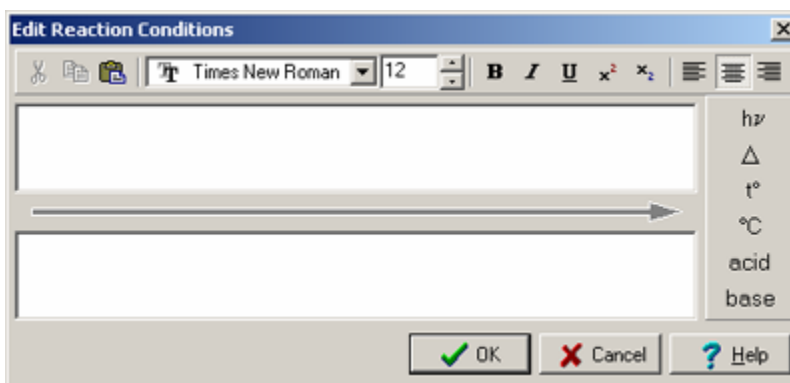
Seuraavilla toiminnoilla  voidaan ilmaista bentseenirenkaan delokalisoituneita elektroneja ja renkaaseen sitoutuneita substituentteja.




Plus ja **Arrow** -toiminnot helpottavat reaktioiden kirjoittamista. Plus -toiminnolla voidaan lisätä plussia reaktioyhtälöön ja vastaavasti Arrow -toiminnolla erilaisia nuolia.

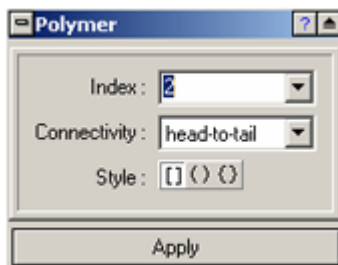


Reaction Arrow Labeling -toiminnolla voidaan reaktionuolen päälle ja alle kirjoittaa tietoja. Lisätietoja pääsee kirjoittamaan, kun reaktionuoli on valittu aktiiviseksi ja klikataan **Reaction Arrow Labeling** -toimintoa. Tällöin avautuu uusi ikkuna (kuva 3), johon tekstiä voidaan kirjoittaa.





Kuva 3. Reaction Arrow Labeling -toiminto.


 **Polymer** -toiminnolla voidaan merkata saman osan toistumista esim. polymeerissä. Toiminnosta löytyy erilaisia sulkeita ja alaindeksin voi itse määritellä (kuva 4).





Kuva 4. Polymer -toiminto.


Seuraavilla toiminnoilla  voidaan vaikuttaa molekyylin orientaatioon. Toiminnot vaikuttavat joko yksittäisten atomien, sidoksien tai koko molekyylin orientaatioon.


 **Instant Template** -toiminnolla voidaan monistaa rakenteita. Kun toiminto on aktiivisena, voidaan haluttu rakenne kopioida klikkaamalla jotakin kohtaa rakenteesta. Kopioitu rakenne saadaan lisättyä työpöydälle klikkaamalla kohtaa, johon se halutaan lisätä.


 **Clean Structure** -toiminto tasaa kaikki sidospituudet ja sidoskulmat samansuuruisiksi.


 **Check for Tautomeric Forms** -toiminto ehdottaa yhdisteelle tautomeerirakenteita.

 **3D Optimization** -toiminto liittää molekyyliin kaikki vedyt ja optimoi kaikki sidokset kolmiulotteisesti mahdollisimman kauaksi toisistaan.

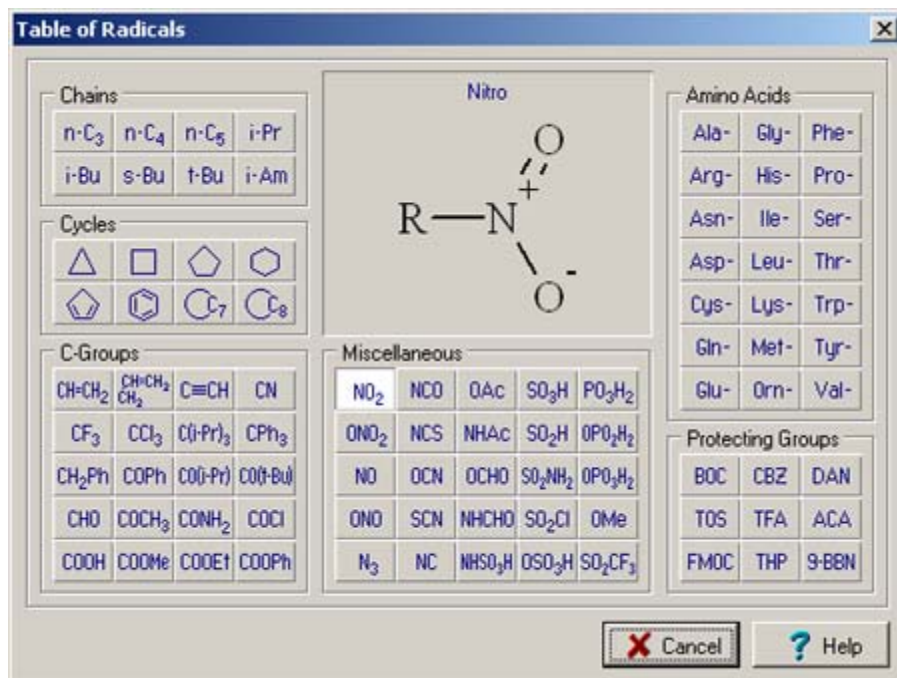
 **MassSpec Scissors** -toiminto tekee ehdotuksia kuinka molekyyli pilkkoutuisi massaspektrometrimittauksissa.

 **Periodic Table of Elements** -toimintoa klikkaamalla aukeaa jaksollinen järjestelmä. Jokaisesta atomista saa tarkempia tietoja klikkaamalla halutun atomin aktiiviseksi.

Seuraavilla toiminnoilla  voidaan lisätä molekyyliin varauksia ja/tai radikaalimerkki klikkaamalla atomia, johonka lisäys halutaan tehdä.


 **Atom Chemical Properties** -toiminnolla voidaan vaikuttaa atomin varauksen suuruuteen, lisätä atomiin hapetusluku tai voidaan korvata atomi kokonaan numeromerkinnällä.

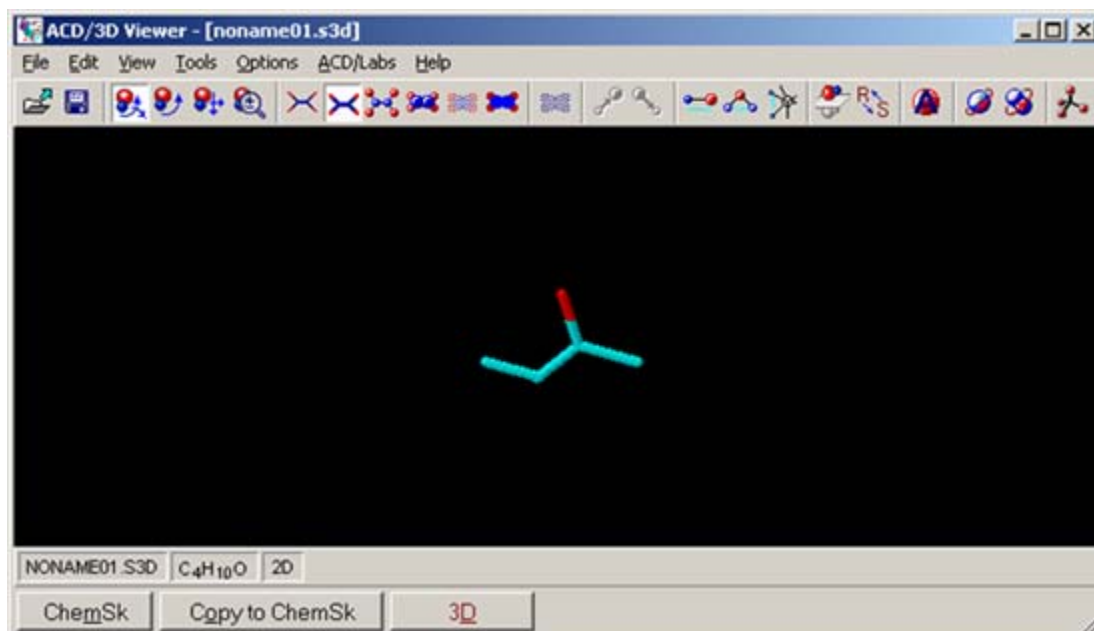
 **Table of Radicals** -toiminto avaa ikkunan, jossa on valmiita rakenteita (kuva 5).



Kuva 5. Table of Radicals -toiminto.

3D Viewer

Kun klikkaa  **3D Viewer** -toimintoa, aukeaa 3D Viewer -ikkuna (kuva 6). 3D Viewer -ikkunassa piirtämiään molekyyliä voi katsella kolmiulotteisina.



Kuva 6. 3D Viewer.



Rotate -toiminnoilla voidaan pyörittää valittuja rakenteita. Valittavana on joko 3D Rotate tai Rotate -toiminnot. 3D Rotate -toiminnolla voidaan molekyyliä pyöritellä kolmiulotteisesti ja vastaavasti Rotate -toiminnolla tasossa. Kun Rotate -toiminta on valittu aktiiviseksi, rakennetta voidaan pyörittää hiirellä, kun hiiren vasen näppäin on alas painettuna.



3D-molekyylin ulkoasua voidaan vaihtaa seuraavilla toiminnoilla. Molekyyliä voi katsella muun muassa lanka-, tikku- ja pallotikkumallina.



Auto Rotate ja **Auto Rotate and Change Style** -toiminnot pyörittävät molekyyliä automaattisesti. Jälkimmäisessä toiminnossa pyörimisen lisäksi molekyylin ulkoasu vaihtuu muutaman sekunnin välein.

