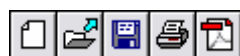


1) Grundfunktionen von Chems sketch



Structure/Draw: zwischen den Modi hin und her schalten



1) Neue Datei öffnen 2) Datei öffnen 3) speichern 4) Datei drucken 5) Datei als pdf speichern



Rückgängig machen und wiederherstellen



1) Atom/Molekül entfernen 2) ausschneiden 3) in Ablage kopieren 4) aus Ablage einfügen



Größen verändern



Template – Window anzeigen



Molekülname generieren lassen

2. Funktionen im Structure – Mode



1. 2. 3. 4. 5. 6. 7. 8. 9. 10. 11. 12. 13. 14. 15. 16. 17. 18. 19) 20. 21. 22. 23

- 1) auswählen und verschieben
- 2) auswählen, verschieben, vergrößern
- 3) 3-D Drehung
- 4) – 7) Zeichenarten
- 8) – 11) Auswahl verschiedener Bindungstypen
- 12) Negative/Positive Ladung anbringen
- 13) Reaktionspfeil
- 14) Position einzelner Atome verändern
- 15) – 17) Positionen von Bindungen verändern
- 18) – 19) horizontal und vertikal drehen
- 20) ausgewähltes Template (z.B. Kohlenstoffkette) einfügen
- 21) Struktur bereinigen (Grafik optimieren)
- 22) Tautomere suchen

23) 3-D – Optimierung



In diesen beiden Menüs können Elemente oder auch Verbindungsteile ausgewählt werden.

Mit kann ein text dem Molekül hinzugefügt werden, mit ein R für Reste an den Molekülen.

Mit können die Atome im Molekül durchnummeriert, bzw. ihnen Eigenschaften zugeordnet werden.

Der Button öffnet ein Menü mit vorgefertigten Strukturbausteinen, wie Aromaten oder Sulfonsäuregruppen etc.

2. Funktionen im Draw – Mode



markieren / verschieben



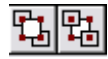
Objekt markieren und um die eigene Achse drehen



Punkte verschieben



Text(feld) hinzufügen



Objekt in den Vordergrund / den Hintergrund rücken



Verschiedene Objekte gruppieren/entgruppieren



Objekt vertikal / horizontal / um 90° Drehen

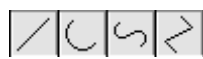


linksbündig / zentriert / rechtsbündig ausrichten



Objekt unten / mittlich / oben ausrichten

Vertikale Leiste:



Verschiedene Linien und Bögen zeichnen



Pfeile zeichnen



Verschiedene Formen zeichnen



Text hinzufügen



Klammern und Legenden hinzufügen

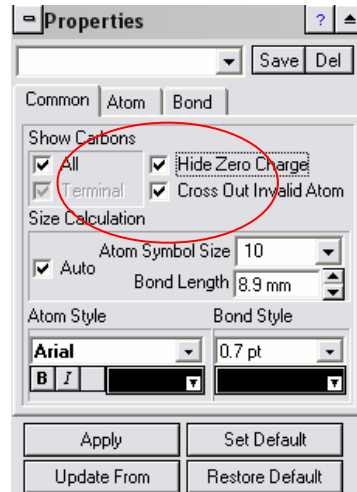
3. ChemsSketch – Spezialeinstellungen

- Wie kann ich alle Kohlenstoffatome anzeigen lassen?

1)

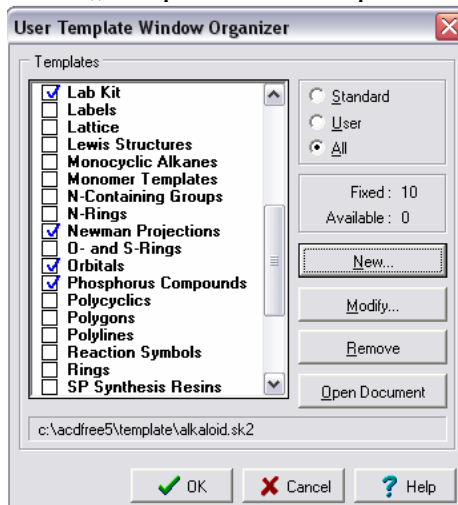


2)



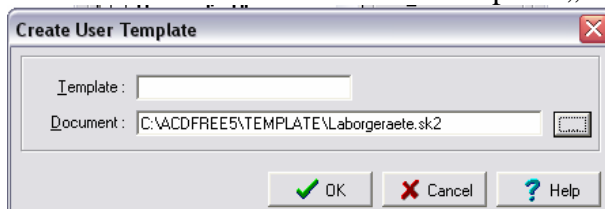
- Wie installiere ich neue Templates?

1) Menü „Templates“ → Template Organizer



2)

Option „New“ wählen



3)

über den [...] - Button Template – Datei auswählen und Namen geben.


- Moleküle ins 3D – Format bringen

1) Molekül zeichnen
2) Unter „tools“, „3D – Optimization“ wählen
3) Unter „ACD/Labs“ Option „3D Viewer“ wählen.

- **Moleküle als Grafiken abspeichern**

- 1) Molekül zeichnen
- 2) Unter Menüpunkt „File“, Option „Export“ wählen.
- 3) Format aussuchen (bestenfalls *.gif)
- 4) Datei benennen und im gewünschten Ordner abspeichern

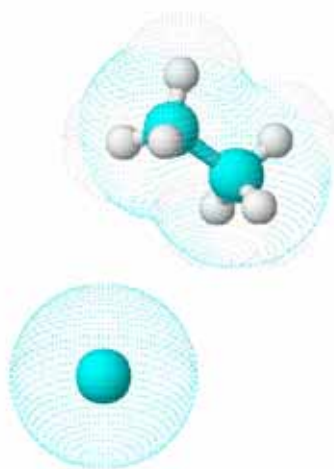
- **Im 3D Viewer Moleküle als Grafiken speichern**

- 1) Computertaste „print screen“ oder „print“ drücken
- 2) Zeichenprogramm öffnen (z.B. Irfan View)
- 3) Option „Einfügen“ im Zeichenprogramm wählen
- 4) Den Bereich mit dem Molekül ausschneiden 
- 5) Noch mal Option „einfügen“ nutzen
- 6) Datei abspeichern

4. Funktionen im 3D Viewer



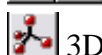
Aus verschiedenen Ansichten wählen. Draht, Stick, Kugeln, etc.



Kugelgrößen verändern



Abstände, Winkel etc. einzelner Atome angeben



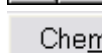
3D Optimierung der Struktur



Farben umdefinieren



1) Autorotation 2) Autorotation mit wechselnder Darstellung



ChemSk

3D

Wechsel zwischen Zeichen- und 3D - Programm