

## 1) Grundfunktionen von Chems sketch 10.0

*Hinweis: In der Version 10.0 mögen einige Buttons ein wenig von den abgedruckten im Design abweichen. Grundsätzlich sind diese jedoch gleich und ebenso zu benutzen,*



**Structure/Draw:** zwischen den Modi wählen

(Structure-Modus zum zeichnen von Molekülen, Draw-Modus zum zeichnen von Geräten und Apparaturen)



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



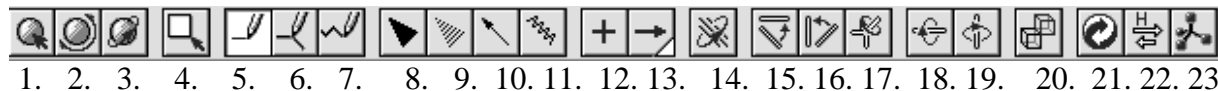
Molekülname generieren lassen



Wechsel zum 3D- Viewer

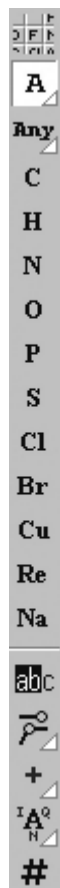
## 2. Funktionen im Structure – Mode

### Horizontale Leiste:



- 1) Objekt auswählen und verschieben
- 2) Objekt auswählen, verschieben, vergrößern
- 3) 3-D Drehung des Objektes
- 4) Auswahl der Markierungsart (Rechteck oder Lasso)
- 5) – 7) Zeichenarten für Bindungen
- 8) – 11) Auswahl verschiedener Darstellung von Bindungen
- 12) Plus für Reaktionsgleichungen einfügen
- 13) Reaktionspfeil und Auswahl der Darstellungsmöglichkeiten
- 14) Ausrichtung funktioneller Gruppen ändern (z. B. CH<sub>3</sub>- , H<sub>3</sub>C-)
- 15) – 16) Das ganze Molekül wird so gedreht, dass die ausgewählte Bindung in der Horizontalen bzw. der Vertikalen liegt.
- 17) Drehung des Moleküls um die Achse der gewählten Bindung
- 18) – 19) horizontal und vertikal drehen des Moleküls bzw. Objekts
- 20) ausgewähltes Molekül vervielfältigen
- 21) Struktur bereinigen (Grafik optimieren)
- 22) Tautomere suchen
- 23) 3-D – Optimierung (überführt die Struktur in eine andere Schreibweise)


### Vertikale Leisten:




In diesen beiden Menüs (links und rechts der Zeichenfläche) können Elemente oder auch Verbindungsteile ausgewählt werden, die in die Molekülstruktur eingebaut werden sollen.

Der Button  in der rechten vertikalen Leiste öffnet ein Menü mit vorgefertigten Strukturbausteinen, wie Aromaten oder Sulfonsäuregruppen etc.



Mit  in der linken vertikalen Leiste können Molekülteile umbenannt sowie Elementsymbole eingefügt werden.

Mit  kann ein R für Reste an den Molekülen eingefügt werden.







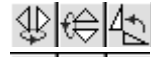

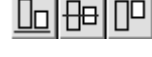
Mit  können den Atomen Eigenschaften (wie z.B. Valenzen, Isotopenbezeichnung) zugeordnet werden.

Mit  können Atome in einem Molekül durchnummeriert werden.

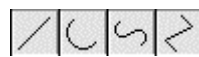




## 2. Funktionen im Draw – Mode

### Horizontale Leiste:



-  markieren / verschieben
-  Objekt markieren und um die eigene Achse drehen
-  Punkte verschieben (Ecken abrunden)
-  bestehendes Textfeld bearbeiten
-  Objekt in den Vordergrund / den Hintergrund rücken
-  Verschiedene Objekte gruppieren/entgruppieren
-  Objekt vertikal spiegeln/ horizontal spiegeln/ um 90° Drehen
-  linksbündig / zentriert / rechtsbündig ausrichten
-  Objekt unten / mittig / oben ausrichten

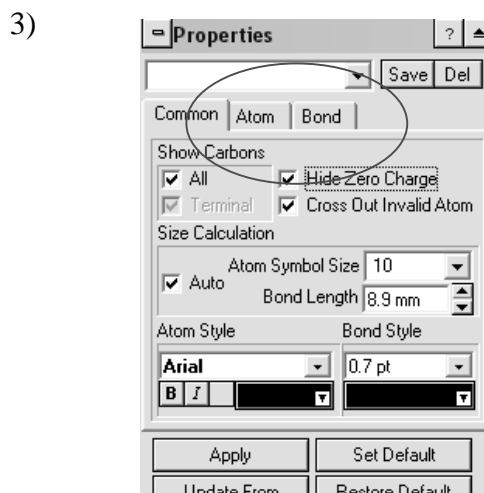
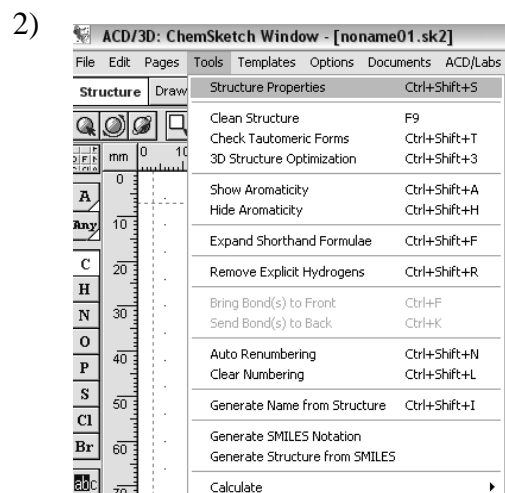
### Vertikale Leiste:

-  Verschiedene Linien und Bögen zeichnen
-  Pfeile zeichnen und Pfeilspitzen an bestehende Linien knüpfen
-  Verschiedene Formen zeichnen
-  Textfeld hinzufügen
-  Klammern und Legenden hinzufügen

## 3. ChemsSketch – Spezialeinstellungen

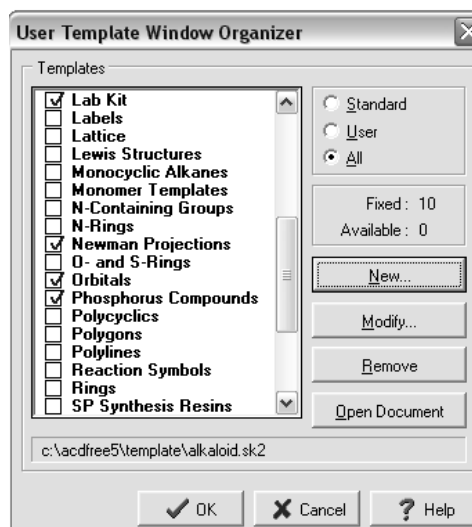
- **Wie kann ich alle Kohlenstoffatome anzeigen lassen?**

1) Das Molekül, in dem die Kohlenstoffatome angezeigt werden sollen, markieren



- **Wie installiere ich neue Templates?**

1) Menü „Templates“ → Template Organizer



2) Option „New“ wählen

3) über den [...] - Button Template – Datei auswählen.



4) Dem Template einen Namen geben und OK klicken

- **Moleküle ins 3D – Format bringen**

1) Molekül zeichnen

2) Unter dem Menüpunkt „tools“ „3D – Optimization“ wählen

3) Unter dem Menüpunkt „ACD/Labs“ Option „3D Viewer“ wählen.

- **Moleküle als Grafiken abspeichern**

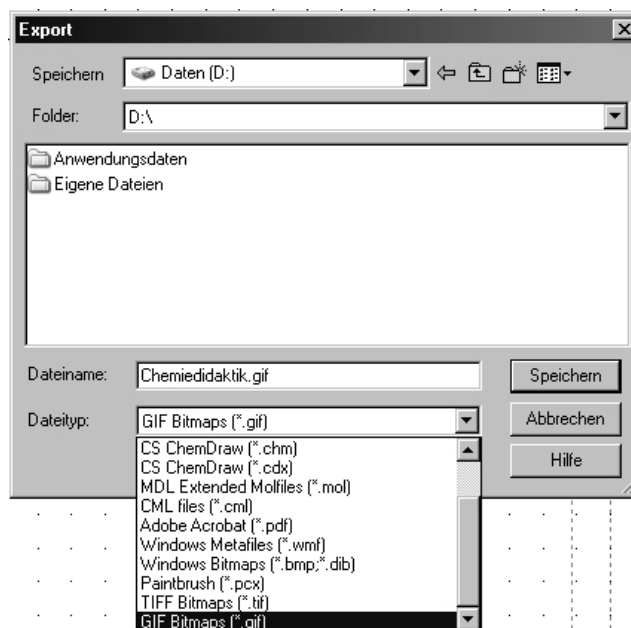
1) Molekül zeichnen

2) Unter Menüpunkt „File“ Option „Export“ wählen.


3) Ein Dateiformat bzw. Dateityp aussuchen (bestenfalls \*.gif)

4) Datei benennen

5) Gewünschten Ordner wählen und abspeichern



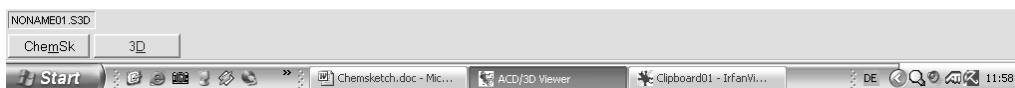
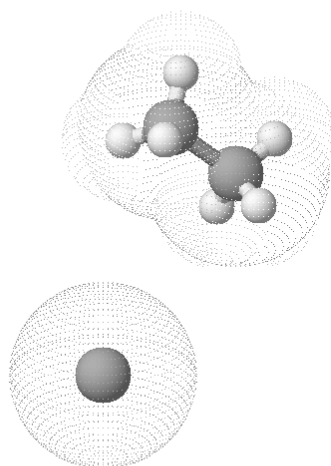
- **Im 3D Viewer Moleküle als Grafiken speichern**

- 1) Computertaste „print screen“, „print“ oder auch „Druck“ drücken (erstellen eines Screenshots)
- 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



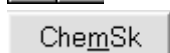
3D Optimierung der Struktur



Farben umdefinieren



1) Autorotation 2) Autorotation mit wechselnder Darstellung



ChemSk 3D Wechsel zwischen Zeichen- und 3D - Programm