

Kurzanleitung ACD/ChemSketch

ACD/ChemSketch ist ein freeware-Programm und unter <http://www.acdlabs.com> (Menüpunkt *free stuff*) erhältlich.

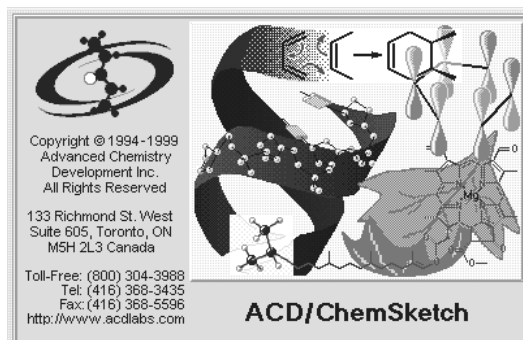
Die Datei chemsk40.exe ist 5.4 MB groß. Zur Installation werden 10 MB freier Speicherplatz auf der Festplatte benötigt.

Ein ausführliches Benutzerhandbuch (.pdf-Format) kann geladen werden. Patches und Zusatzprogramme werden ebenfalls angeboten.

Mithilfe dieses Programms lassen sich Strukturformeln erstellen und die Eigenschaften der dargestellten Verbindungen berechnen.

Die erstellten Formeln können entweder direkt über die Zwischenablage in andere Anwendungen eingebunden werden oder exportiert werden (z. B. als .gif, .tif, .wmf, .bmp).

Formeln werden im **Structure-Modus** erstellt. Reaktionspfeile und andere Zeichenobjekte werden im **Draw-Modus** gezeichnet.



Erstellen einer Strukturformel (Structure-Modus):

C-Kette zeichnen: "C" auf linker Menüleiste anklicken, auf Zeichenfläche klicken. Bei gedrückt gehaltener Shift-Taste mit linker Maustaste Bindungen ziehen.

PSE: Durch Anklicken des PSE-Fensters öffnet sich ein PSE, in dem durch Anklicken des entsprechenden Symbols ein Element ausgesucht werden kann. Es wird in dem Vertikalmenü aufgelistet und kann von dort aus weiter verwendet werden

Mehrfachbindungen: Auf Bindung mit linker Maustaste klicken.

Atome oder Atomgruppen durch andere ersetzen: Atomgruppe aussuchen und zu ersetzende Gruppe anklicken.

Tool-Fenster benutzen: Tool-Fenster "Structure Properties" öffnen. Nach Markierung eines Atoms oder eines Molekülbereichs im Tool-Fenster entsprechende Option auswählen und mit *apply* auf den markierten Bereich anwenden.

Hinweis: Für Schulchemie: "Common" ⇒ "Show Carbons" ⇒ "all" aktivieren!

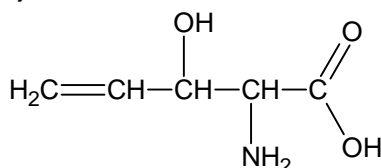
Position von Atomen innerhalb einer Atomgruppe ändern: Symbol (*change position*) in oberer Menüleiste anklicken, Atomgruppe in der Formel so oft anklicken, bis gewünschte Position erreicht ist.

Molekül aus templates einfügen: Template öffnen, Molekül im Structure-Modus anklicken. Durch Klicken mit linker Maustaste auf Zeichenfläche einfügen. Ein Klicken der rechten Maustaste beendet das Einfügen.

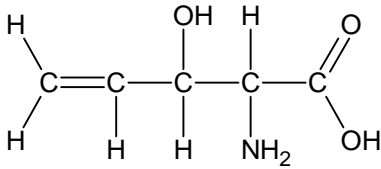
Fangraster ein- und ausschalten: *Option* in Menüleiste anklicken.

Beispiele:

a)

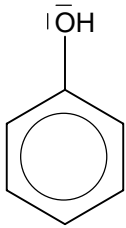


- "C" aus linker Menüleiste auswählen, Kette mit fünf C-Atomen mit gedrückter shift-Taste und linker Maustaste ziehen.
- Bindung anklicken, um Doppelbindung zu erzeugen.
- Auf linker Menüleiste Symbol zum Ersetzen von Atomgruppen ("abc") anklicken, auf rechtes C-Atom klicken und COOH aus der Liste auswählen. *Expand* anklicken.
- Aus linker Menüleiste "N" auswählen, am zweiten C-Atom von rechts eine Bindung nach unten ziehen bei gedrückter shift-Taste.
- "O" auswählen, Bindung am dritten C-Atom nach oben ziehen.



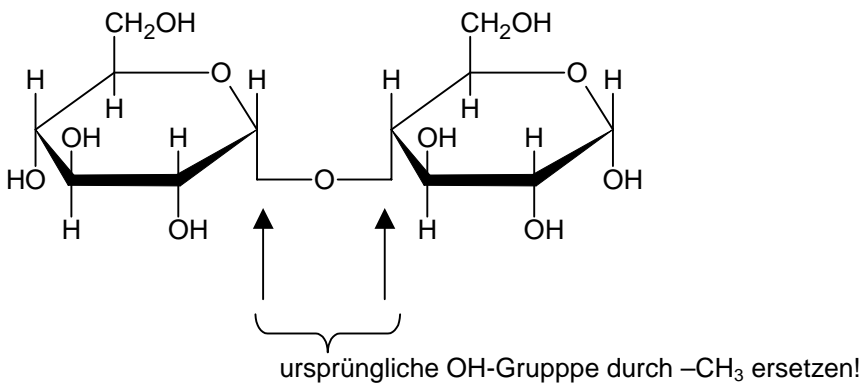
- "H" auswählen, von den entsprechenden Atomen in der Zeichnung Bindungen ausziehen.
- Formel markieren (mit Lasso) und über die Zwischenablage z. B. in Word-Dokument stellen.

b)



- Im structure-Modus aus Template "aromatics" Benzolring auswählen.
- Tool-Fenster öffnen, Ring markieren, *show carbons* "all" inaktivieren.
- "C" anklicken, Bindungen anklicken, bis Einfachbindungen entstehen.
- "O" auswählen, OH-Gruppe mit Bindung
- In Draw-Modus wechseln
- Mit gedrückter shift-Taste Kreis ausziehen.
- Kreis in Ring einfügen. Fanggitter ausschalten (*Options*), um den Ring besser positionieren zu können.
- Freie Elektronenpaare zeichnen (Draw-Modus!)

c)



- Aus "Template windows" *Sugars: alfa-D-Pyr* auswählen.
- zwei Mal " α -D-Glucopyranose" kopieren.
- Moleküle markieren, aus Tool-Fenster bei "Show carbons" "All" inaktivieren.
- -OH-Gruppe durch $-\text{CH}_3$ ersetzen (dazu "C" auswählen!)
- An diese $-\text{CH}_3$ -Gruppe $-\text{OH}$ binden
- Ein Molekül markieren und die beiden $-\text{OH}$ -Gruppen reagieren lassen (= Molekül auf anderes schieben!)

ACD/ChemSketch im Structure-Modus

The screenshot shows the ACD/ChemSketch interface in Structure-Modus. The menu bar includes File, Edit, Pages, Tools, Templates, Options, Documents, ACD/Labs, and Help. The toolbar contains various drawing and editing tools. A ruler at the top indicates a scale in millimeters (mm).

Annotations on the left side of the interface:

- C, H, N, O, P, S, Cl, Br:** PSE markieren
- erstellt CH₄, H₂, NH₃, H₂O usw.:** Tools öffnet ein Fenster, das es ermöglicht, die erstellten Strukturformeln zu bearbeiten
- Templates:** stellt Molekülbausteine zur Verfügung
- ändert Position von Atomen:** (indicated by arrows pointing to the ruler)
- abc:** ersetzt Atomgruppen durch andere
- R:** ersetzt durch Reste
- +**: erhöht oder erniedrigt die Ladung
- #:** nummeriert Atome

The **Properties** dialog box is open, showing the **Common** tab. It includes options for **Show Carbons** (All, Terminal, Hide Zero Charge, Cross Out Invalid Atom), **Size Calculation** (Atom symbol size: 10, Bond length: 8.9 mm), and **Atom Style** (Arial, 0.7 pt). Buttons for Apply, Set Default, Update From, and Restore Default are visible.

ACD/ChemSketch im Draw-Modus

The screenshot shows the ACD/ChemSketch interface in Draw-Modus. The menu bar includes File, Edit, Pages, Tools, Object, Templates, Options, Documents, ACD/Labs, and Help. The toolbar contains various drawing and editing tools. A ruler at the top indicates a scale in millimeters (mm).

Annotations on the left side of the interface:

- markieren:** (indicated by arrows pointing to the selection tool)
- In Hinter- oder Vordergrund legen:** (indicated by arrows pointing to the layering tools)
- drehen und kippen:** (indicated by arrows pointing to the rotation and skew tools)
- ausrichten:** (indicated by arrows pointing to the alignment tools)
- gruppierten oder Gruppierung aufheben:** (indicated by arrows pointing to the group and ungroup tools)
- bearbeitet Punkte:** (indicated by arrows pointing to the point editing tool)
- bearbeitet Text:** (indicated by arrows pointing to the text editing tool)

The **Draw-Modus** funktioniert wie ein übliches (Vektor-) Zeichenprogramm.

Linien und Standardformen können aus der linken Menüleiste ausgewählt werden. Regelmäßige Formen (Kreise, Quadrate) erhält man durch gleichzeitige Drücken der Shift-Taste beim Ausziehen mit der linken Maustaste.

Gruppierungen, Objekte in den Hinter- oder in den Vordergrund legen, drehen, kippen und ausrichten sind möglich.

Mit **Tools** können Linienstärke und -farbe und Füllungen ausgewählt werden.