

# Οδηγίες χρήσης των προγραμμάτων ChemDraw και Chem3D

Δρ Μαρία Κογιώνη

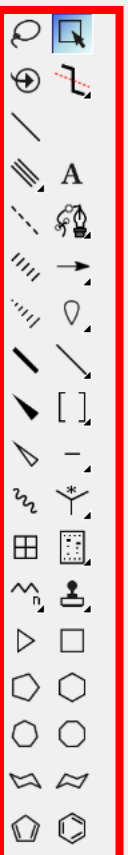
Οκτώβριος 2020

## Περιεχόμενα

- Main toolbar
- Σχεδιασμός ευθείας ανθρακικής αλυσίδας
- Σχεδιασμός βενζολικών δακτυλίων
- Σχεδιασμός οπτικών αντίποδων
- Τοποθέτηση φορτίων
- Σχεδιασμός χημικών αντιδράσεων
- Σχεδιασμός μηχανισμών
- Δημιουργία φασμάτων  $^1\text{H-NMR}$
- “Analysis Window”
- “Ball and Stick” απεικονίσεις – Chem3D

Ανοίγουμε το πρόγραμμα κάνοντας double click στο εικονίδιο του προγράμματος





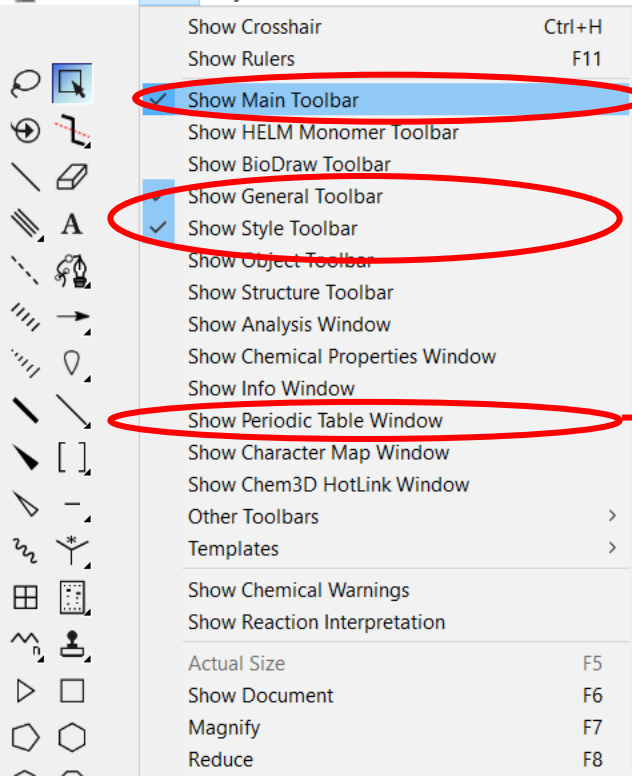
Main Toolbar



General Toolbar

Style Toolbar

Ανοίγοντας το πρόγραμμα θα πρέπει να είναι ορατά το Main, General και Style Toolbars.



Periodic Table Window

Αν δεν είναι ορατά το Main, General και Style Toolbars, τότε μπορείτε να τα εμφανίσετε από το menu **View**. Σημειώστε ότι από εδώ μπορείτε να εμφανίσετε και άλλα Toolbars και παραθυράκια όπως για παράδειγμα του παράθυρο του Περιοδικού πίνακα (Show Periodic Table Window)

## Το Main Toolbar περιλαμβάνει όλα τα βασικά εργαλεία που χρειαζόμαστε για το σχεδιασμό χημικών δομών.

Περιστροφή ενός μορίου στο χώρο.

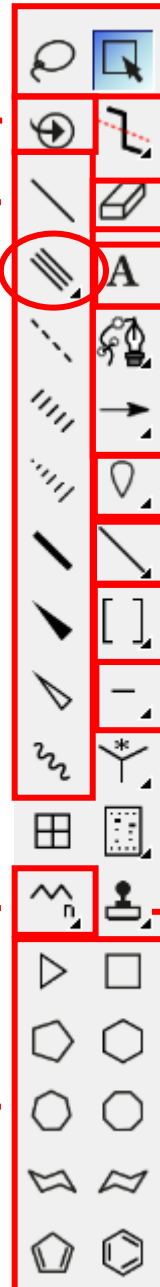
Τα διάφορα είδη χημικών δεσμών απλός, πολλαπλός, διακεκομένος, σφήνες κοκ.

Τα εργαλεία που έχουν το μικρό βελάκι στη γωνιά σημαίνει ότι περιλαμβάνουν πτυσσόμενο μενού. Αφήνοντας πατημένο το αριστερό πλήκτρο του mouse θα σας το εμφανίσει.



Εργαλείο για τη δημιουργία ευθείων ανθρακοαλυσίδων.

Διάφορα είδη δακτυλίων.



Lasso και Marquee, έχουν την ίδια λειτουργία και τα χρησιμοποιούμε για την επιλογή απομονωμένων δεσμών, ατόμων ή ολόκληρων χημικών δομών.

Σβηστήρι

Text tool: μπορούμε να το χρησιμοποιήσουμε για να εισάγουμε τα άτομα στις χημικές δομές, για να γράψουμε συνθήκες και αντιδραστήρια κοκ.

Εργαλεία για το σχεδιασμό βελών (πτυσσόμενο menu).

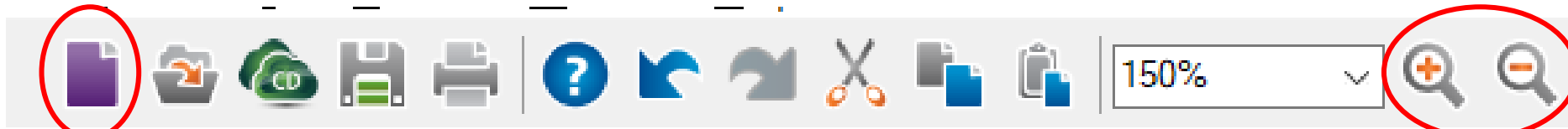
Απεικονίσεις τροχιακών (πτυσσόμενο menu).

Γεωμετρικά σχήματα, γραμμές και καμπύλες (πτυσσόμενο menu).

Αγκύλες και σύμβολα για μεταβατικές καταστάσεις και ενδιάμεσα (πτυσσόμενο menu).

Φορτία, ζεύγη ηλεκτρονίων και μονήρη ηλεκτρόνια (πτυσσόμενο menu).

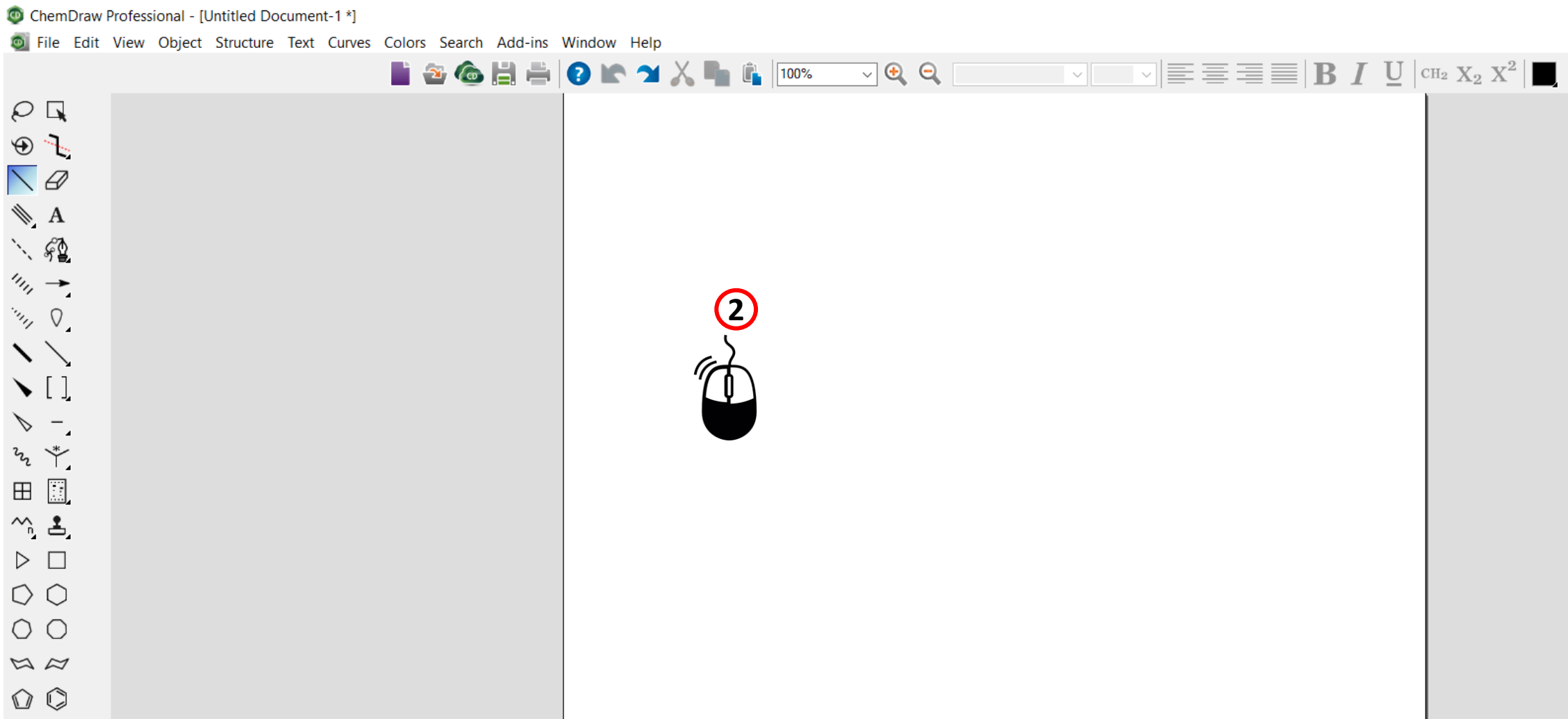
Σφραγίδα, πτυσσόμενο menu με templates, μπορούμε να βρούμε έτοιμες σχεδιασμένες χημικές δομές κτλ



Δημιουργία νέας  
σελίδας ή μπορώ να  
κάνω το ίδιο με τα  
πλήκτρα “ctrl + N”

Μεγέθυνση ή  
σμίκρυνση της  
σελίδας. Μπορώ να το  
κάνω και μετα  
πλήκτρα F7  
(μεγένθυνση) και F8  
(σμίκρυνση)

Για να σχεδιάσουμε μια χημική ένωση επιλέγουμε το εργαλείο που χρειαζόμαστε π.χ. απλό χημικό δεσμό κάνοντας απλά αριστερό click και στη συνέχεια κάνουμε αριστερό click στο χαρτί εργασίας για να το τοποθετήσουμε.

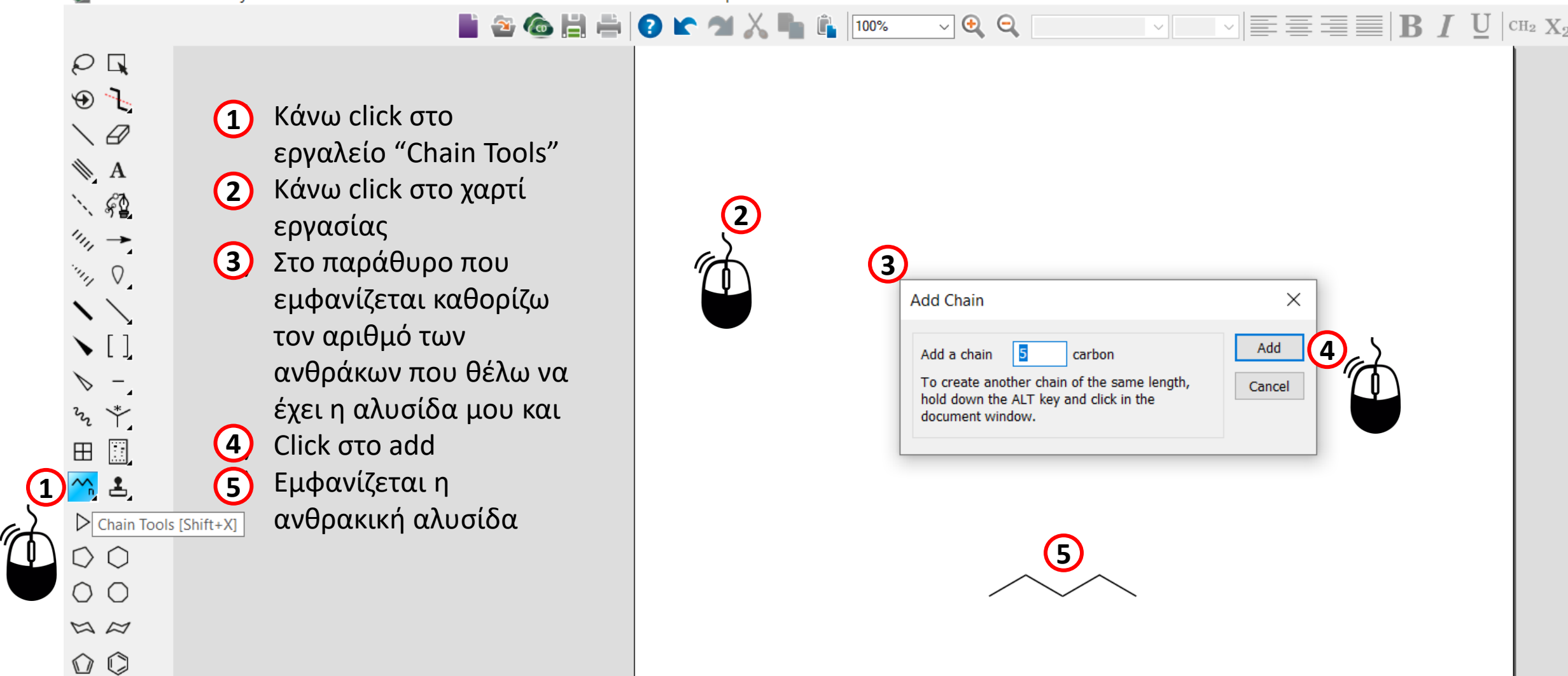




# Σχεδιασμός ευθείας ανθρακικής αλυσίδας

ChemDraw Professional - [Untitled Document-1 \*]

File Edit View Object Structure Text Curves Colors Search Add-ins Window Help



**1** Κάνω click στο εργαλείο “Chain Tools”

**2** Κάνω click στο χαρτί εργασίας

**3** Στο παράθυρο που εμφανίζεται καθορίζω τον αριθμό των ανθράκων που θέλω να έχει η αλυσίδα μου και

**4** Click στο add

**5** Εμφανίζεται η ανθρακική αλυσίδα

Add Chain

Add a chain  carbon

To create another chain of the same length, hold down the ALT key and click in the document window.

Add Cancel

Chain Tools [Shift+X]

CH<sub>2</sub> X<sub>2</sub>

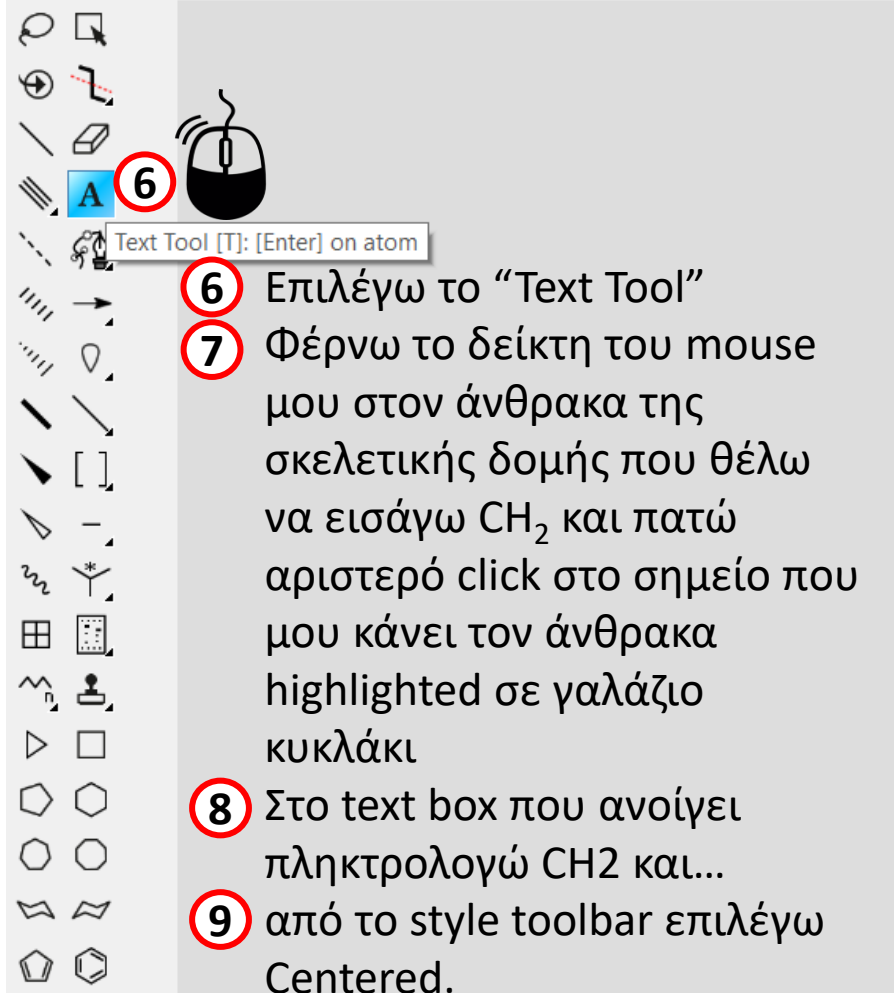
Σημ. ότι σχεδιάζουμε στο ChemDraw για να το μεταφέρουμε σε ένα Word Document απλά το επιλέγουμε με το lasso και κάνουμε copy (ctrl + C) και paste (ctrl + V) στο Word Document.

## Σχεδιασμός ευθείας ανθρακικής αλυσίδας (συνέχεια)

ChemDraw Professional - [Untitled Document-1 \*]

File Edit View Object Structure Text Curves Colors Search Add-ins Window Help

100% CH<sub>2</sub> X<sub>2</sub> X<sup>2</sup>

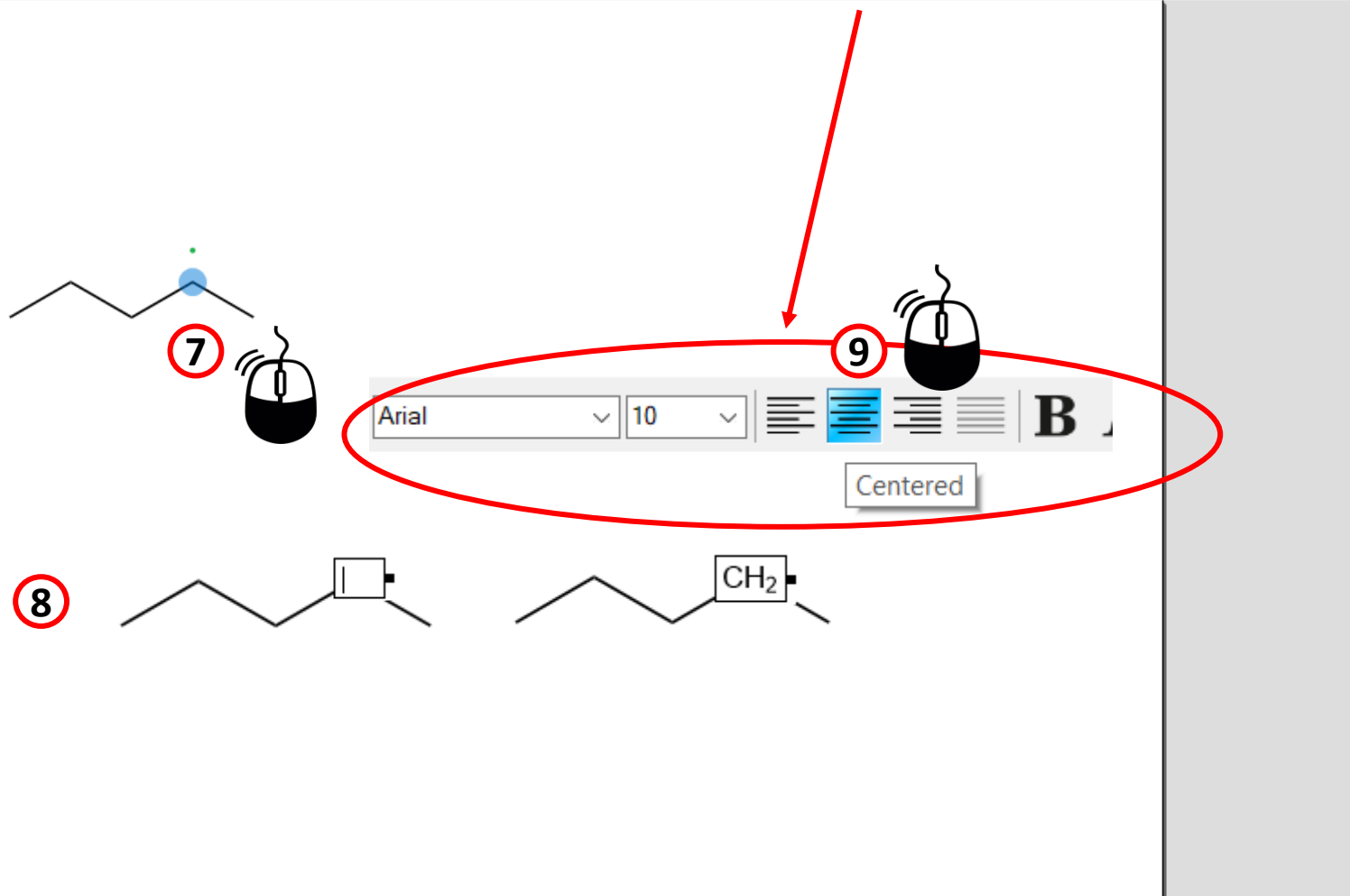


6 Επιλέγω το "Text Tool"

7 Φέρνω το δείκτη του mouse μου στον άνθρακα της σκελετικής δομής που θέλω να εισάγω CH<sub>2</sub> και πατώ αριστερό click στο σημείο που μου κάνει τον άνθρακα highlighted σε γαλάζιο κυκλάκι

8 Στο text box που ανοίγει πληκτρολογώ CH<sub>2</sub> και...

9 από το style toolbar επιλέγω Centered.



7

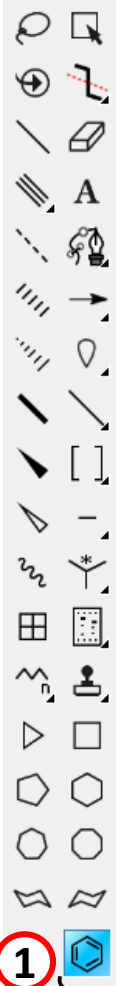
8

9

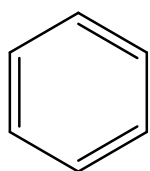
# Σχεδιασμός βενζολικών δακτυλίων

ChemDraw Professional - [Untitled Document-1 \*]

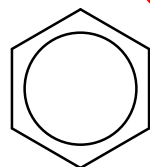
File Edit View Object Structure Text Curves Colors Search Add-ins Window Help



- 1 Click στο tool "benzene" και
- 2 Click στο χαρτί εργασίας για να εμφανιστεί ο δακτύλιος
- 3 Αν δεν θέλουμε τους εντοπισμένους διπλούς δεσμούς στο βενζόλιο αλλά τον κύκλο τότε παράλληλα με το αριστερό click έχουμε πατημένο το "ctrl"
- 4 Για να προσθέσουμε υποκαταστάτες επιλέγουμε το "Solid Bond" tool και
- 5 πατάμε αριστερό click στον ανθρακα που θέλουμε να προσθέσουμε τον υποκαταστάτη.



2



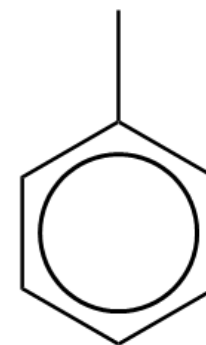
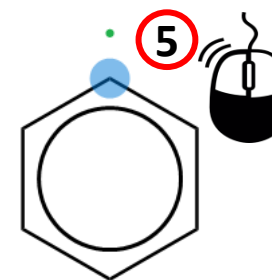
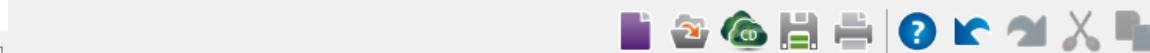
3



+ ctrl

ChemDraw Professional - [Untitled Document-1 \*]

File Edit View Object Structure Text Curves Colors Search Add-ins Window Help



# Σχεδιασμός οπτικών αντίποδων

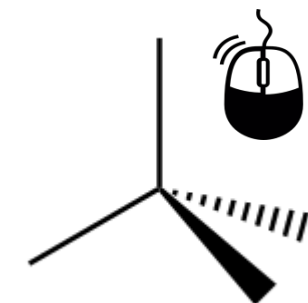
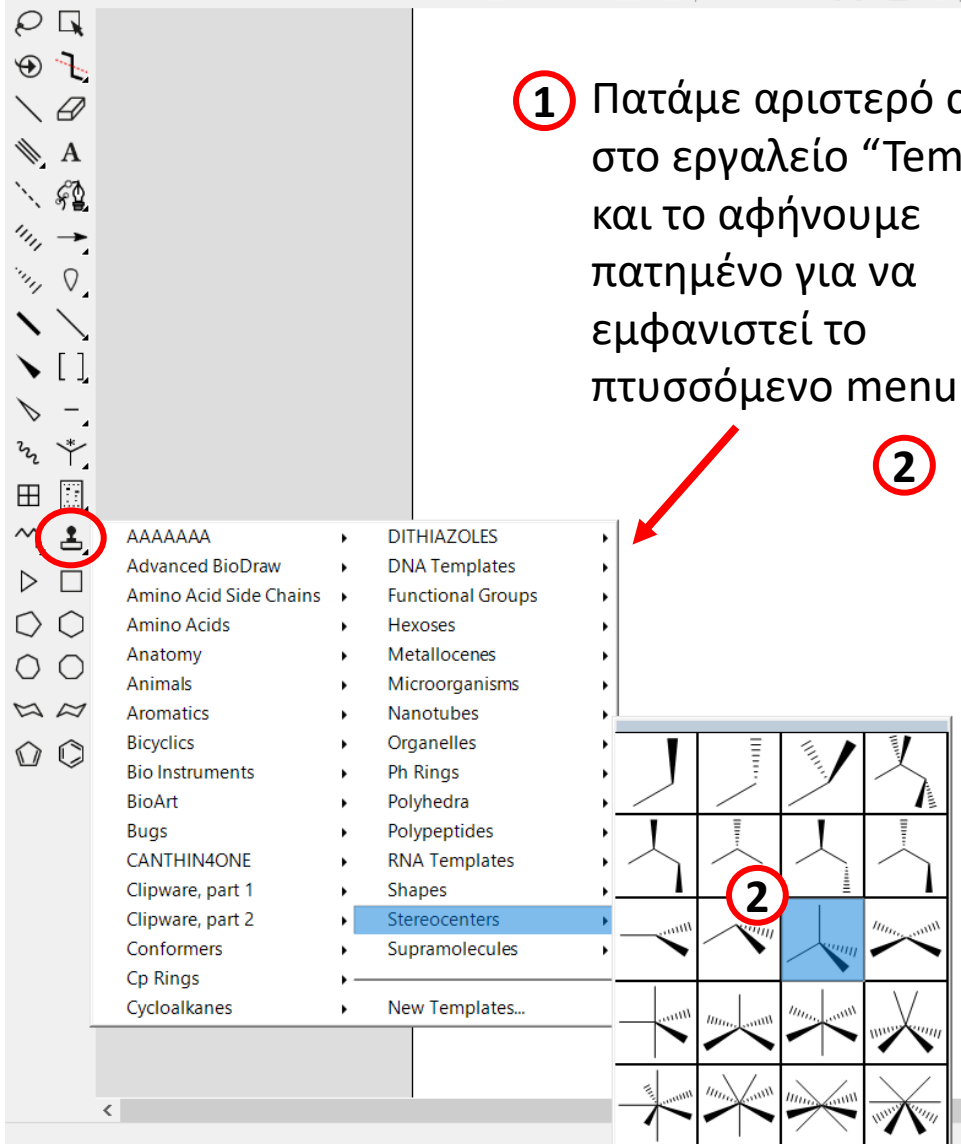
ChemDraw Professional - [Untitled Document-1 \*]  
File Edit View Object Structure Text Curves Colors Search Add-ins Window Help

150% CH<sub>2</sub> X<sub>2</sub> X<sup>2</sup>

**1** Πατάμε αριστερό click στο εργαλείο “Templates” και το αφήνουμε πατημένο για να εμφανιστεί το πτυσσόμενο menu

**2** Σέρνοντας το mouse βρίσκουμε το menu “Stereocenters” και όταν φέρουμε τον δείκτη μας πάνω στη δομή που θέλουμε να χρησιμοποιήσουμε ελευθερώνουμε το mouse.

**3** Πατάμε αριστερό click στο χαρτί εργασίας για να εμφανιστεί η δομή

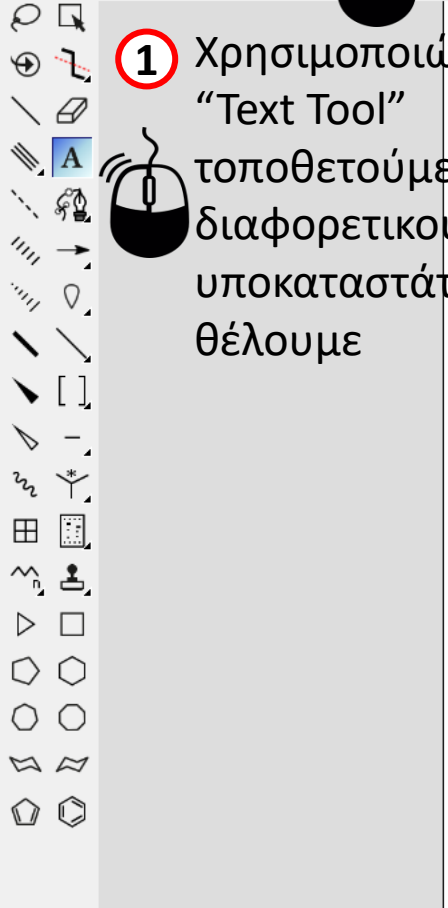


# Σχεδιασμός οπτικών αντίποδων (συνέχεια)

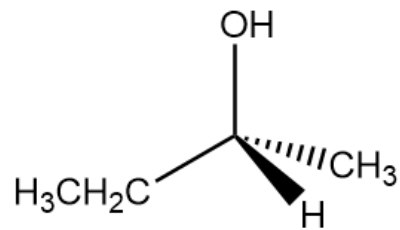
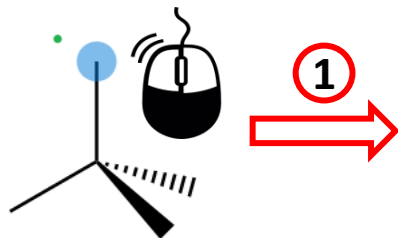
ChemDraw Professional - [Untitled Document-1 \*]

File Edit View Object Structure Text Curves Colors Search Add-ins Window Help

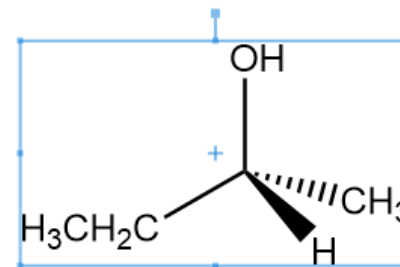
150%  $\text{CH}_2$   $\text{X}_2$   $\text{X}^2$



1 Χρησιμοποιώντας το "Text Tool" τοποθετούμε τους 4 διαφορετικούς υποκαταστάτες που θέλουμε



2 Με το "Lasso" επιλέγουμε την ένωση και την κάνουμε copy paste



3 Επιλέγουμε τη δεύτερη ένωση και από το menu "Object" επιλέγουμε "Flip Horizontal"

# Σχεδιασμός οπτικών αντίποδων (συνέχεια)

ChemDraw Professional - [Untitled Document-1 \*]

File Edit View Object Structure Text Curves Colors Search Add-ins Window Help

The screenshot shows the ChemDraw Professional software interface. The 'Object' menu is open, and the 'Flip Horizontal' option is selected. The main workspace displays a sequence of four chemical structures illustrating the horizontal flipping of a chiral center. A red arrow points from the second structure to the third, and a red circle with the number '3' is next to a mouse cursor icon.

Structure 1: A chiral center with an OH group (top), a CH<sub>3</sub> group (dashed wedge, right), and an H atom (solid wedge, bottom-right).

Structure 2: The same chiral center, but with a blue selection box around it. The CH<sub>3</sub> group is now a solid wedge pointing right, and the H atom is a dashed wedge pointing bottom-right.

Structure 3: The result of a horizontal flip. The OH group is top, the H atom is a solid wedge pointing bottom-right, and the CH<sub>3</sub> group is a dashed wedge pointing right.

Structure 4: The final structure, which is the mirror image of Structure 1. The OH group is top, the H atom is a solid wedge pointing bottom-left, and the CH<sub>3</sub> group is a dashed wedge pointing right.

# Τοποθέτηση φορτίων

ChemDraw Professional - [Untitled Document-1 \*]

File Edit View Object Structure Text Curves Colors Search Add-ins Window Help

150% CH<sub>2</sub> X<sub>2</sub> X<sup>2</sup>

1

Αριστερό click για να ανοίξει το πτυσσόμενο menu των "Chemical Symbols" και επιλέγω το φορτίο που χρειαζομαι

OH

2

OH



Φέρνω το δείκτη πανω στο άτομο που θέλω να προσθέσω το φορτίο και πατώ αριστερό click



O<sup>-</sup>H

3

Με το λάσο μπορώ να επιλέξω το φορτίο και να του αλλάξω θέση ή να του αλλάξω μέγεθος φέρνοντας το δείκτη του mouse στη γωνιά ούτως ώστε να εμφανιστεί το διπλό βέλος

O<sup>=</sup>H

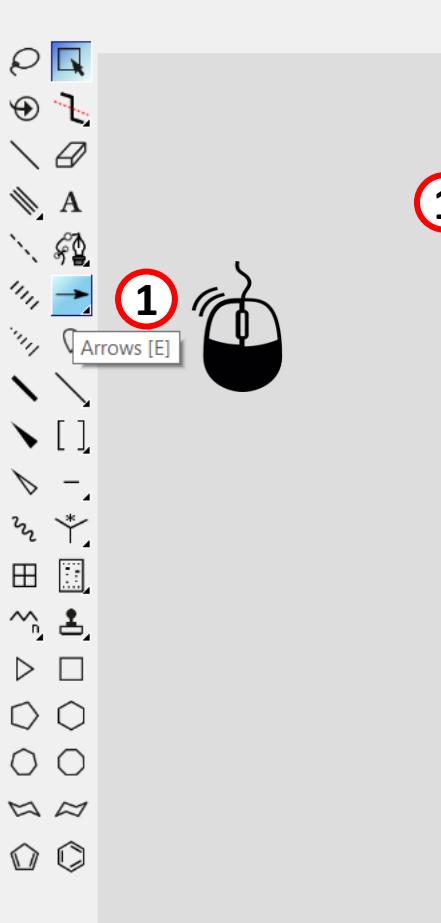
4

Με τον ίδιο τρόπο μπορώ να τοποθετήσω μονήρη ηλεκτρόνια, ζεύγη ηλεκτρονίων κ.α.

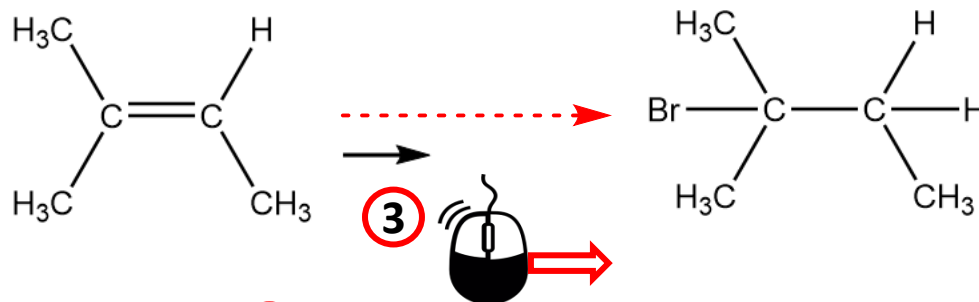
# Σχεδιασμός χημικών αντιδράσεων

ChemDraw Professional - [Untitled Document-1 \*]

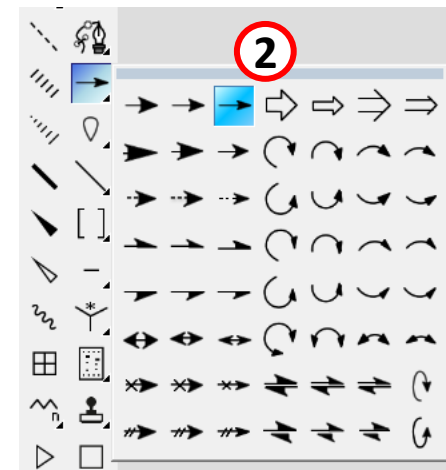
File Edit View Object Structure Text Curves Colors Search Add-ins Window Help



**1** Για να τοποθετήσουμε τόξα χημικών αντιδράσεων χρησιμοποιούμε το εργαλείο “Arrows”



**3** Στο χαρτί εργασίας πατάμε αριστερό click εκεί που θέλουμε να αρχίζει το τόξο μας και σέρνουμε το mouse (με το αριστερό click ακόμη πατημένο) προς τη κατεύθυνση που θέλουμε να δείχνει το τόξο μας



**2** Στο πτυσσόμενο menu που εμφανίζεται φέρνουμε το δείκτη μας πάνω από το τόξο που μας ενδιαφέρει



## Σχεδιασμός χημικών αντιδράσεων (συνέχεια)

Για να στοιχίσω τις δομές με το βέλος που έχω σχεδιάσει ούτως ώστε να φαίνονται συγκυρισμένα μπορώ να τα επιλέξω όλα μαζί με το Lasso και στη συνέχεια από το menu "Object" επιλέγω Align → T/B centers

The screenshot displays the ChemDraw Professional interface. The 'Object' menu is open, showing options like 'Fixed Lengths', 'Fixed Angles', and 'Align'. The 'Align' option is selected, and a sub-menu is visible with 'T/B centers' highlighted. A chemical structure of a brominated ethane derivative is shown with a blue lasso around it, and a blue arrow points to the right, indicating the alignment action.

ChemDraw Professional - [Untitled Document-1 \*]  
File Edit View **Object** Structure Text Curves Colors Search Add-ins Window Help

Object Settings...  
Apply Object Settings from >  
✓ Fixed Lengths Ctrl+L  
✓ Fixed Angles Ctrl+E  
Show Stereochemistry  
Attach Data...  
Annotate...  
Center on Page  
**Align** >  
Distribute >  
Add Frame >  
Group Ctrl+G  
Ungroup Shift+Ctrl+G  
Join Ctrl+J  
Bring to Front F2  
Send to Back F3  
Flatten  
Flip Horizontal Shift+Ctrl+H  
Flip Vertical Shift+Ctrl+V  
Rotate 180° Horizontal Alt+Shift+Ctrl+H  
Rotate 180° Vertical Alt+Shift+Ctrl+V  
Rotate... Ctrl+R  
Scale... Ctrl+K

Left edges Alt+Shift+Ctrl+L  
L/R centers Alt+Shift+Ctrl+C  
Right edges Alt+Shift+Ctrl+R  
Top edges Alt+Shift+Ctrl+T  
**T/B centers Alt+Shift+Ctrl+M**  
Bottom edges Alt+Shift+Ctrl+B

17

## Σχεδιασμός χημικών αντιδράσεων (συνέχεια)

Από το ίδιο μενυ επιλέγοντας “Distribute → Horizontally, κατανέμει το χώρο ούτως ώστε οι δομές να έχουν ίση απόσταση από το τόξο.

The screenshot shows the ChemDraw Professional interface. The 'Object' menu is open, and the 'Distribute' option is selected, which has opened a sub-menu with 'Horizontally' selected. The main workspace shows a chemical reaction. On the left, a molecule with a double bond between two carbon atoms is shown. The left carbon is bonded to two methyl groups (H<sub>3</sub>C), and the right carbon is bonded to a hydrogen atom (H) and a methyl group (CH<sub>3</sub>). A blue box highlights the entire molecule. An arrow points to the right, where the resulting molecule is shown. The double bond has been replaced by a single bond, and the two carbon atoms are now separated by a distance that matches the width of the original double bond. The left carbon is now bonded to a bromine atom (Br) and a methyl group (H<sub>3</sub>C), while the right carbon is bonded to a hydrogen atom (H) and a methyl group (CH<sub>3</sub>). A blue box highlights the resulting molecule.

# Σχεδιασμός χημικών αντιδράσεων (συνέχεια)

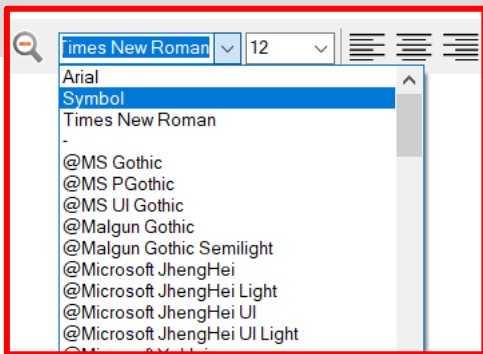
ChemDraw Professional - [Untitled Document-1 \*]

File Edit **View** Object Structure Text Curves Colors Search Add-ins Window Help

5

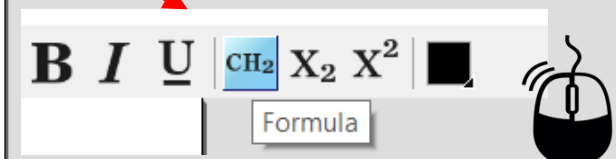
1 Με το εργαλείο Text tool μπορούμε να γράψουμε αντιδραστήρια και συνθήκες πάνω από το τόξο.

4 Για να γράψω με ελληνικούς χαρακτήρες είτε αλλάζω τη γλώσσα του πληκτρολογίου μου σε ελληνικά (Ctrl + Shift) ή αλλάζω από το Style Toolbar τη γραμματοσειρά σε Symbol



2 Μπορείτε να αλλάξετε τη γραμματοσειρά και το Font Size από το style toolbar.

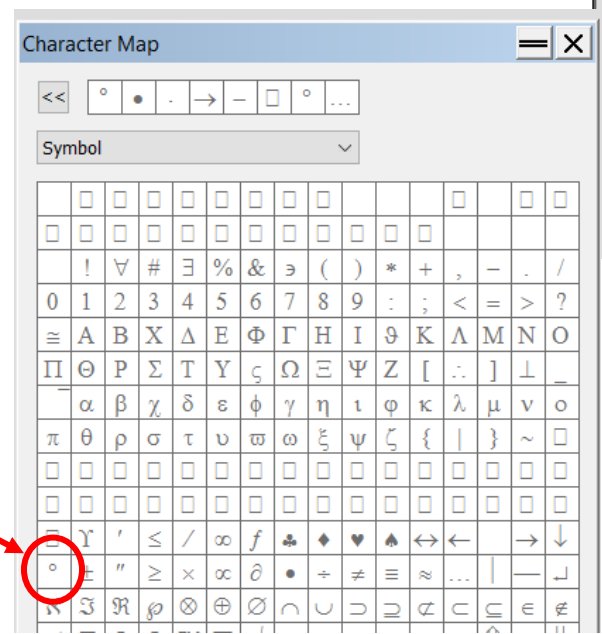
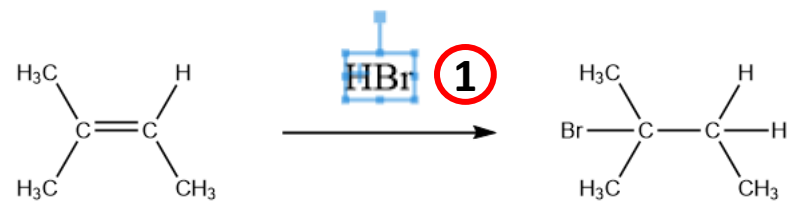
3



3 Σημειώστε ότι όταν το text box δεν είναι συνδεδεμένο πάνω σε κάποια χημική δομή και γράψω ένα μοριακό τύπο τότε οι αριθμοί δεν θα είναι subscript. Σε αυτή τη περίπτωση επιλέγω το text box και από το style toolbar επιλέγω Formula



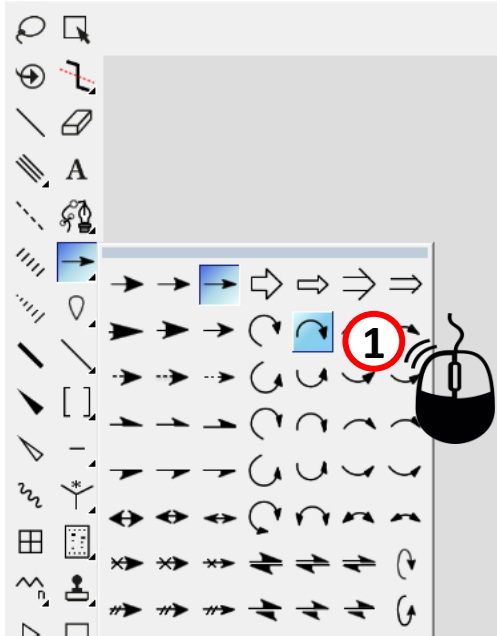
5 Από το menu View → Show Character Map Window Μας εμφανίζει παραθυράκι με διάφορους χαρακτήρες που μπορεί να φανούν χρήσιμοι όπως για παράδειγμα το σύμβολο για τους βαθμούς Κελσίου



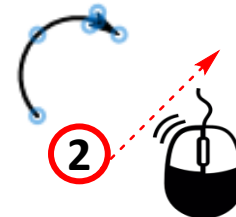
## Σχεδιασμός μηχανισμών

- 1 Για το σχεδιασμό μηχανισμών θα χρειαστούμε τα κυρτά βέλη από το πτυσσόμενο μενού του εργαλείου "Arrows". Ανοίγω το μενού έχοντας πατημένο το αριστερό click και σέρνοντας το mouse φέρνοντας το δείκτη μου πάνω από το τόξο που με ενδιαφέρει, όπου και ελευθερώνω το mouse.

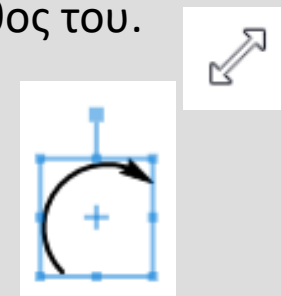
ChemDraw Professional - [Untitled Document-1 \*]  
File Edit View Object Structure Text Curves Colors Search Add-ins Window Help



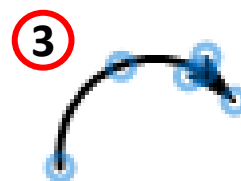
- 2 Για να τοποθετήσω το βέλος πατώ αριστερό click στο χαρτί εργασίας στο σημείο όπου θέλω να ξεκινά και σέρνω το mouse προς τη κατεύθυνση που θέλω και ελευθερώνω το mouse όταν έχω το επιθυμητό μέγεθος.



- 3 Αν επιλέξω ένα βέλος με το lasso και φέρω το δείκτη μου στη γωνιά του γαλάζιου τετραγώνου, ούτως ώστε να εμφανιστεί το διπλό βέλος, μπορώ να αυξομειώσω το μέγεθος του.



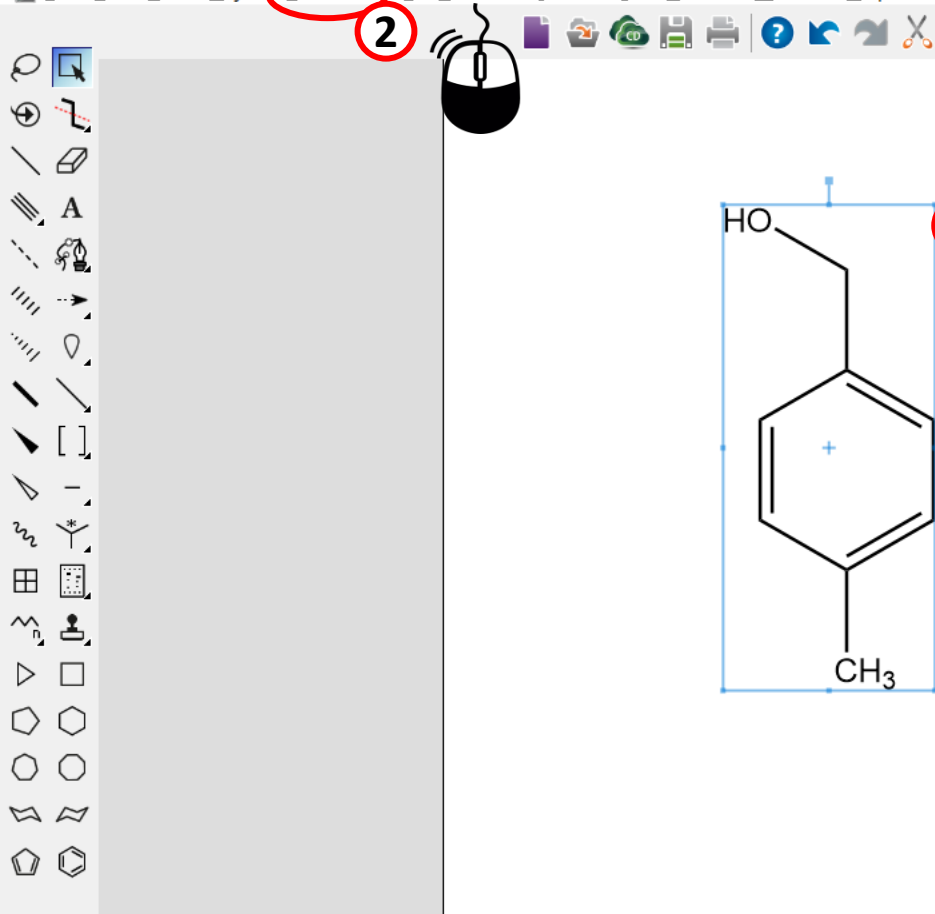
- 3 Αν απλά φέρω το δείκτη του mouse πάνω από το βέλος χωρίς να κάνω click τότε πάνω στο βέλος εμφανίζονται γαλάζια κυκλάκια. Κάνοντας click πάνω σε αυτά τα κυκλάκια και σέρνοντας το mouse (εξακολουθώντας να έχω πατημένο το αριστερό click) τότε μπορώ να αλλάξω τη καμπυλότητα του βέλους μου.



# Δημιουργία φασμάτων $^1\text{H-NMR}$

ChemDraw Professional - [Untitled Document-1 \*]

File Edit View Object **Structure** Text Curves Colors Search Add-ins Window Help



1 Σχεδιάζω την ένωση που με ενδιαφέρει και την επιλέγω με το "Lasso".

2 Από το menu "Structure" επιλέγω "Predict  $^1\text{H-NMR}$  Shifts"

ChemDraw Professional - [Untitled Document-1 \*]

File Edit View Object **Structure** Text Curves Colors Search Add-ins Window Help

2

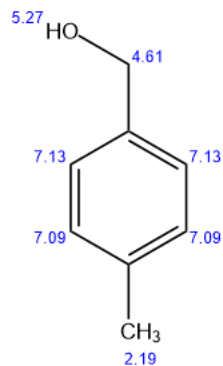
# Δημιουργία φασμάτων $^1\text{H-NMR}$ (συνέχεια)

ChemDraw Professional - [Untitled Document-3 \*]

File Edit View Object Structure Text Curves Colors Search Add-ins Window Help

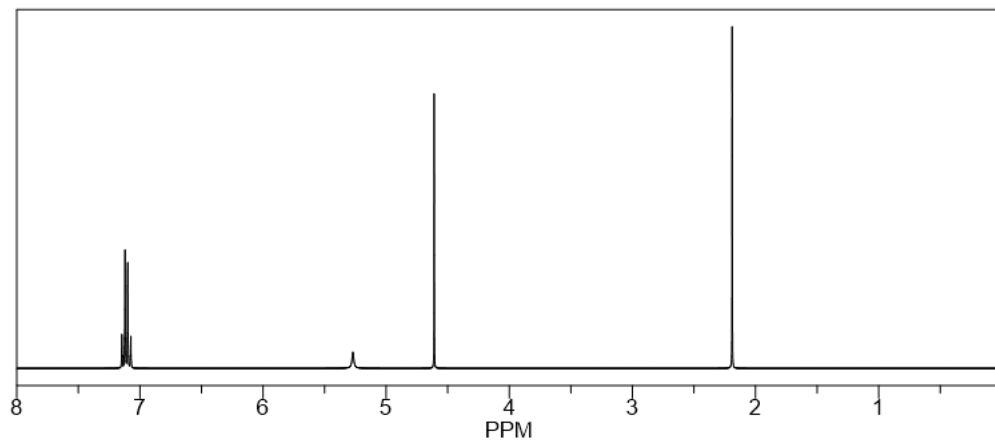
100% CH<sub>2</sub> X<sub>2</sub> X<sup>2</sup>

## ChemNMR $^1\text{H}$ Estimation



Το φάσμα NMR εμφανίζεται σε καινούριο παράθυρο. Φέρνω το δείκτη μου πάνω από τις κορυφές για να δω την αντιστοιχία τους στη χημική δομή.

Estimation quality is indicated by color: **good**, **medium**, **rough**



Protocol of the H-1 NMR Prediction (Lib=SU Solvent=DMSO 300 MHz):

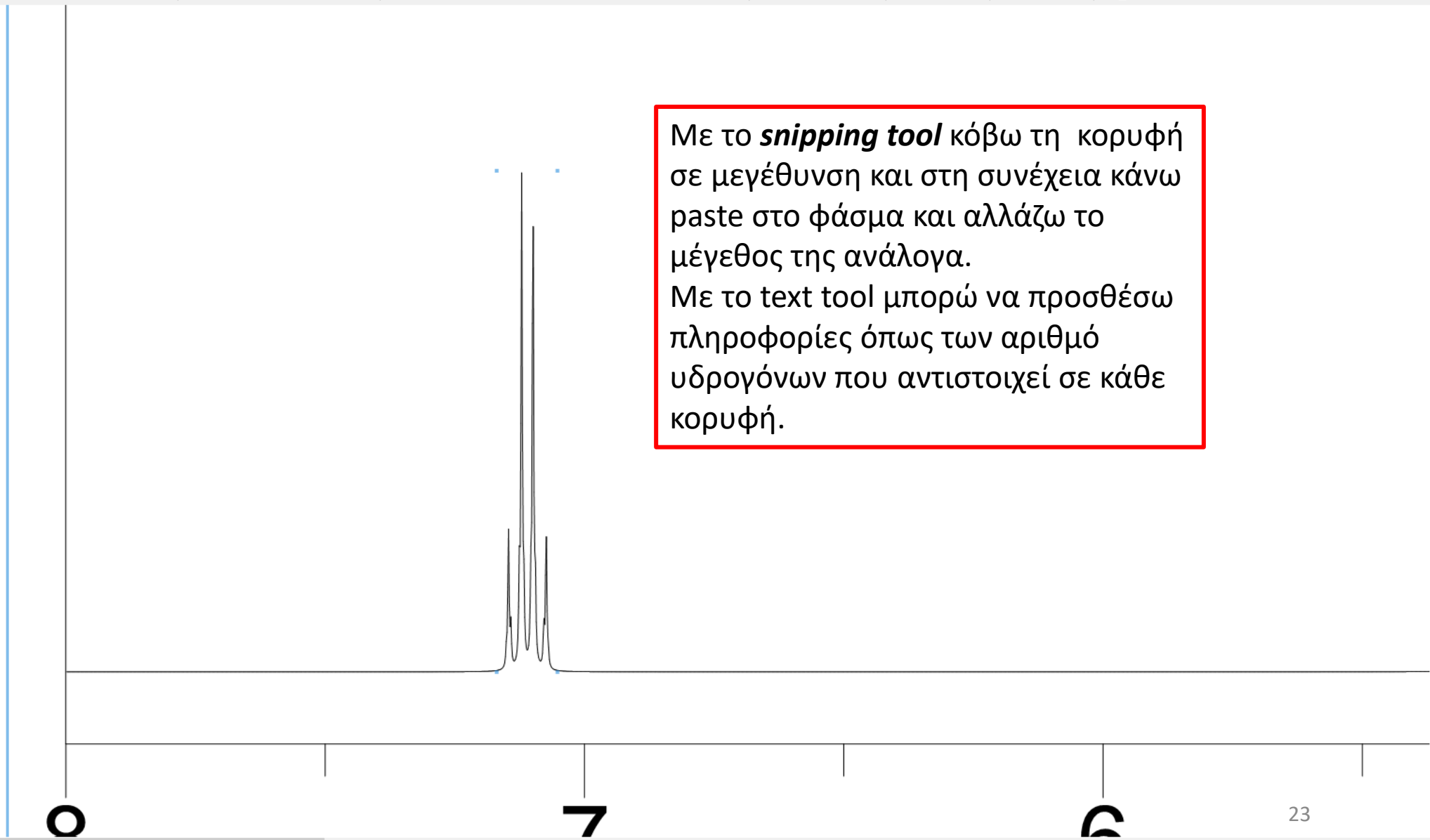
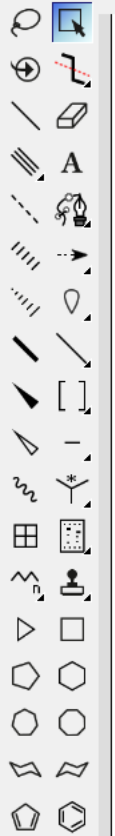
Κάνοντας αριστερό click πάνω σε μια από τις κορυφές μπορώ να την επιλέξω και με το F7 μεγενθύνω τη σελίδα μου με εστίαση σε αυτή τη κορυφή.

# Δημιουργία φασμάτων $^1\text{H-NMR}$ (συνέχεια)

ChemDraw Professional - [Untitled Document-3 \*]

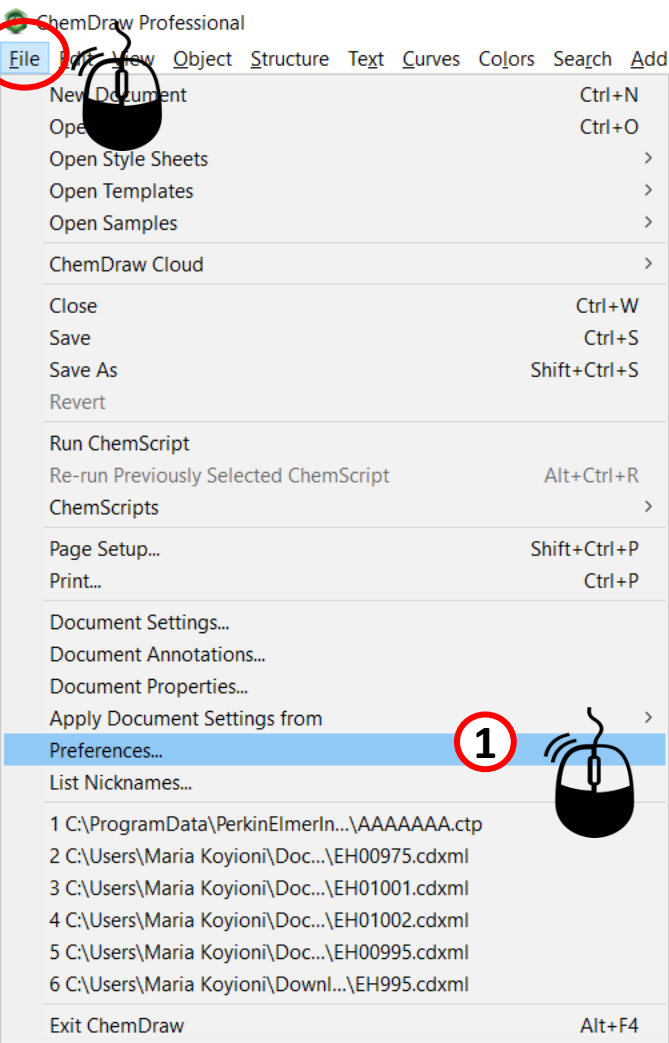
File Edit View Object Structure Text Curves Colors Search Add-ins Window Help

600% CH<sub>2</sub> X<sub>2</sub> X<sup>2</sup>



Με το *snipping tool* κόβω τη κορυφή σε μεγέθυνση και στη συνέχεια κάνω paste στο φάσμα και αλλάζω το μέγεθος της ανάλογα. Με το text tool μπορώ να προσθέσω πληροφορίες όπως των αριθμό υδρογόνων που αντιστοιχεί σε κάθε κορυφή.

# Δημιουργία φασμάτων $^1\text{H-NMR}$ (συνέχεια)

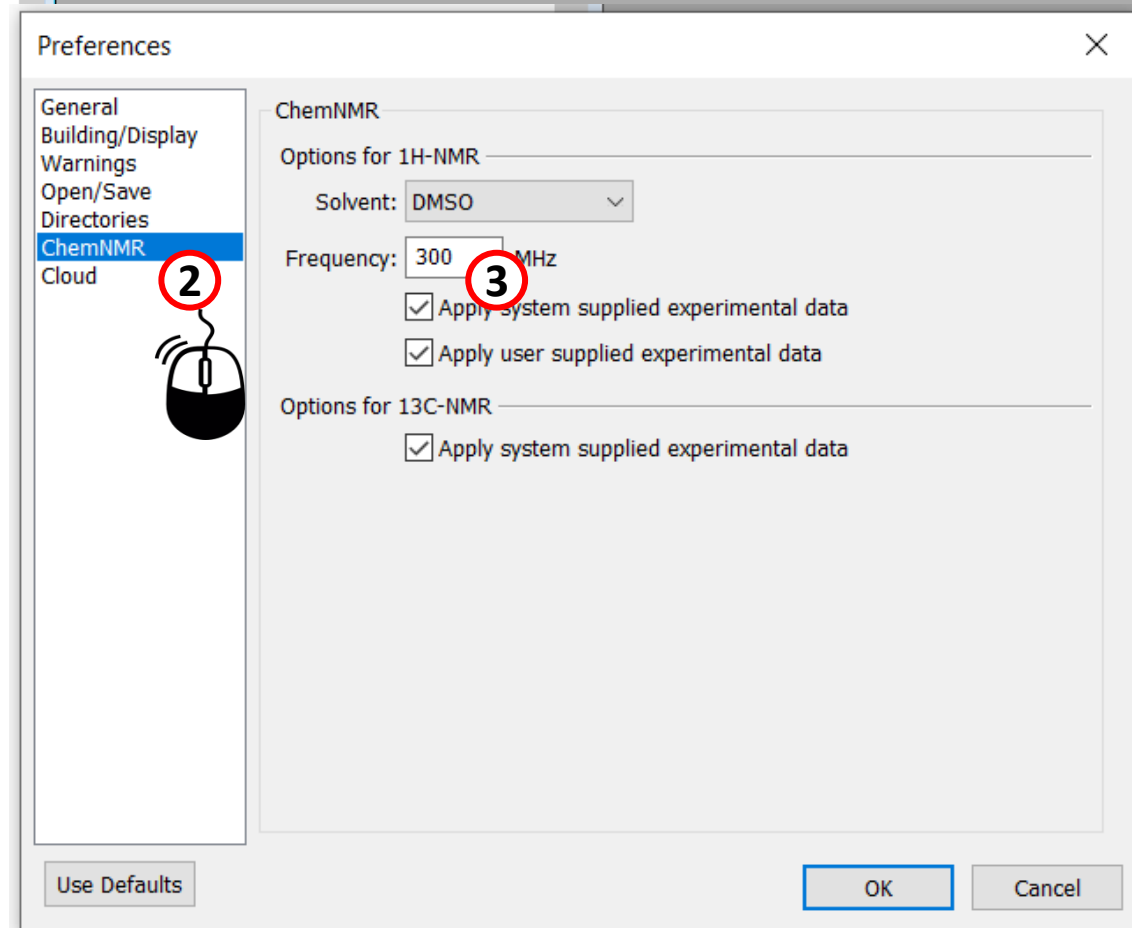


**1** Αν ο διαχωρισμός των κορυφών δεν είναι ικανοποιητικός μπορώ να αλλάξω τη συχνότητα του NMR από το menu “File → Preferences”.

**2** Στο παράθυρο που εμφανίζεται επιλέγω το “ChemNMR”.

**3** Και αλλάζω τη συχνότητα σε ένα πιο μεγάλο αριθμό όπως 1000 MHz.

**4** Ξαναδημιουργώ το φάσμα  $^1\text{H-NMR}$  και παρατηρώ τις διαφορές.





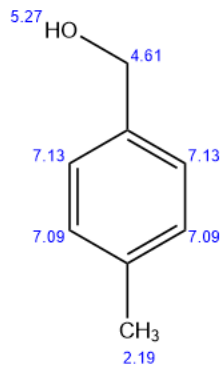
# Δημιουργία φασμάτων $^1\text{H-NMR}$ (συνέχεια)

ChemDraw Professional - [Untitled Document-2 \*]

File Edit View Object Structure Text Curves Colors Search Add-ins Window Help

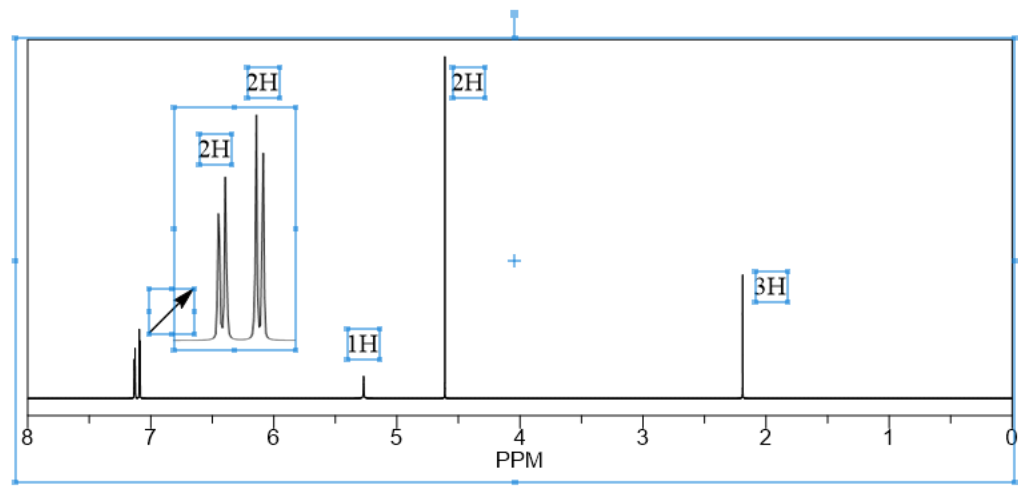
100% Times New Roman 12 **B I U** CH<sub>2</sub> X<sub>2</sub> X<sup>2</sup>

ChemNMR  $^1\text{H}$  Estimation



Για να μεταφέρω το φάσμα, το επιλέγω ολόκληρο με το lasso και στη συνέχεια κάνω copy και paste στο word document.

Estimation quality is indicated by color: good, medium, rough



## “Analysis Window”

- 1 Από το menu View επιλέγω το “Show Analysis Window”. Αυτό θα εμφανίσει ένα καινούριο παραθυράκι.
- 2 Στο παραθυράκι αυτό μας δίνονται πληροφορίες όπως ο μοριακός τύπος (Formula), μοριακό βάρος, το μοριακό ιόν στη φασματοσκοπία μάζας και η στοιχειακή ανάλυση (Elem. Anal.). Αν έχετε περισσότερες της μιας ενώσεις σχεδιασμένες θα πρέπει να επιλέξετε με το Lasso την ένωση που σας ενδιαφέρει.

The screenshot shows the ChemDraw Professional interface. The 'View' menu is open, and 'Show Analysis Window' is highlighted with a red circle and arrow labeled '1'. The 'Analysis' window is open, showing the following data:

Property	Value
Formula	C <sub>8</sub> H <sub>10</sub> O
Exact Mass	122.0732
Mol. Wt.	122.1670
m/z	122.0732 (100.0%), 123.0765 (8.7%)
Elem. Anal.	C, 78.65; H, 8.25; O, 13.10

The chemical structure of 4-methoxytoluene is shown in the center, with a red circle and arrow labeled '2' pointing to it. The 'Analysis' window has a 'Paste' button highlighted with a red circle and arrow labeled '3'. A text box at the bottom left contains the following information, with a red circle and arrow labeled '4' pointing to it:

Chemical Formula: C<sub>8</sub>H<sub>10</sub>O  
Molecular Weight: 122.1670  
Elemental Analysis: C, 78.65; H, 8.25; O, 13.10

- 3 Επιλέγω κάνοντας click στα τετραγωνάκια τις πληροφορίες που με ενδιαφέρουν και πατώ paste.
- 4 Αυτό επικολλά ένα text box με τις πληροφορίες στο χαρτί εργασίας. Επιλέγοντας το εργαλείο Text Tool, στη συνέχεια κάνετε click στο text box, επιλέγετε τις πληροφορίες που θέλετε να χρησιμοποιήσετε και κάνετε copy paste σε ένα Word Document.

# “Ball and Stick” απεικονίσεις – Chem3D

ChemDraw Professional - [Untitled Document-1 \*]

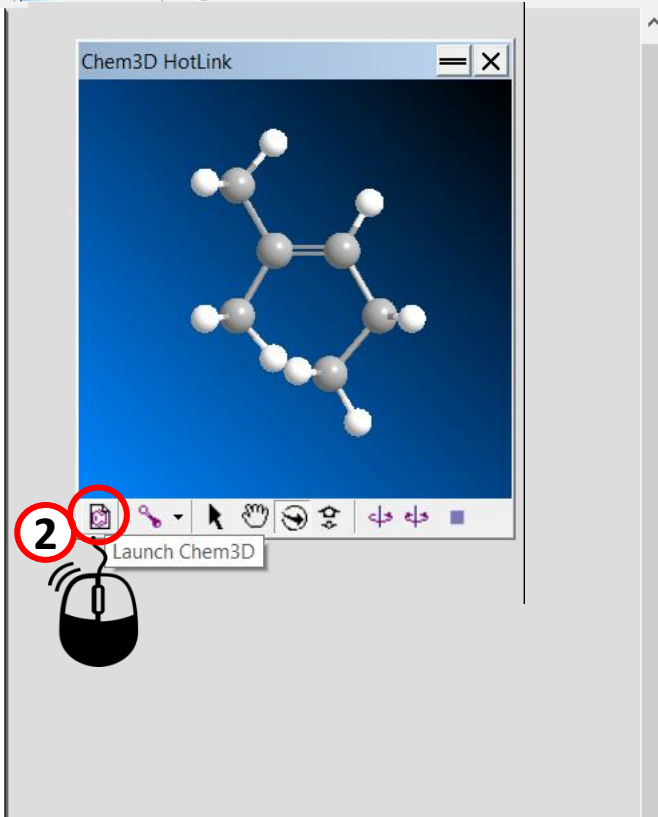
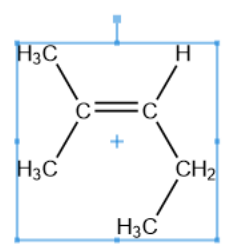
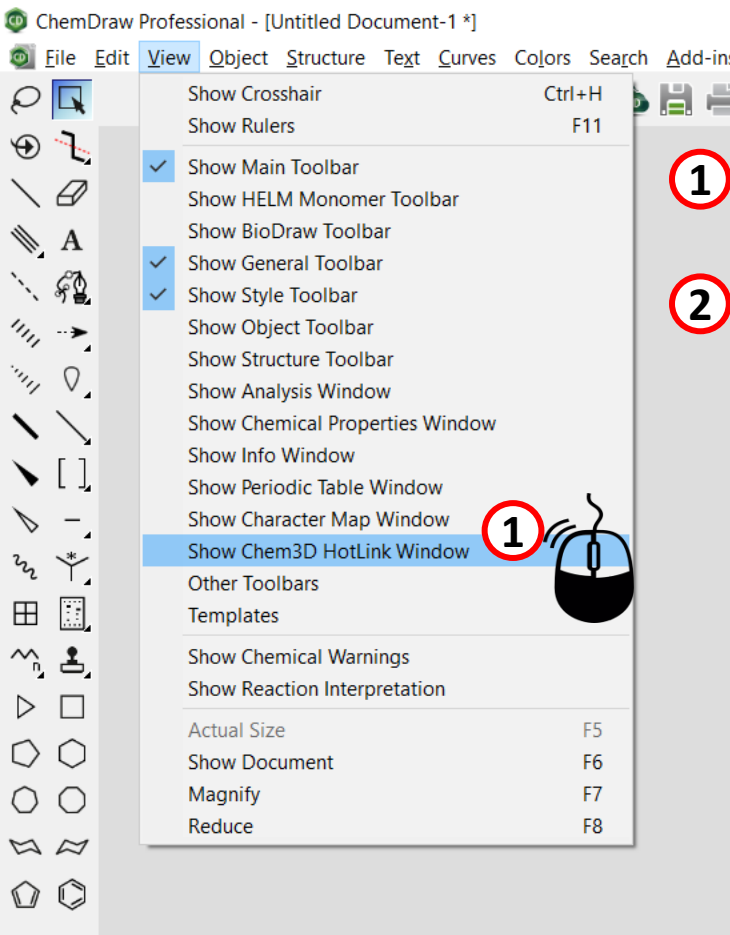
File Edit View Object Structure Text Curves Colors Search Add-ins Window Help

100% Arial 10

CH<sub>2</sub> X<sub>2</sub> X<sup>2</sup>

1 Από το menu View επιλέγω Show Chem3D HotLink Window

2 Επιλέγω με το λάσο την ένωση που με ενδιαφέρει και στο καινούριο παραθυράκι κάνω click το “Launch Chem3D”



Show Crosshair	Ctrl+H
Show Rulers	F11
<input checked="" type="checkbox"/> Show Main Toolbar	
Show HELM Monomer Toolbar	
Show BioDraw Toolbar	
<input checked="" type="checkbox"/> Show General Toolbar	
<input checked="" type="checkbox"/> Show Style Toolbar	
Show Object Toolbar	
Show Structure Toolbar	
Show Analysis Window	
Show Chemical Properties Window	
Show Info Window	
Show Periodic Table Window	
Show Character Map Window	
<input checked="" type="checkbox"/> Show Chem3D HotLink Window	
Other Toolbars	
Templates	
Show Chemical Warnings	
Show Reaction Interpretation	
Actual Size	F5
Show Document	F6
Magnify	F7
Reduce	F8

## “Ball and Stick” απεικονίσεις – Chem3D (συνέχεια)

Chem3D - [Chem3D XML in]

File Edit View Structure Calculations Surfaces Online Window Help

Chem3D XML in

ChemDraw - LiveLink  
Chem/SMILES:

Επιλογή ατόμων

Περιστροφή της δομής στο χώρο

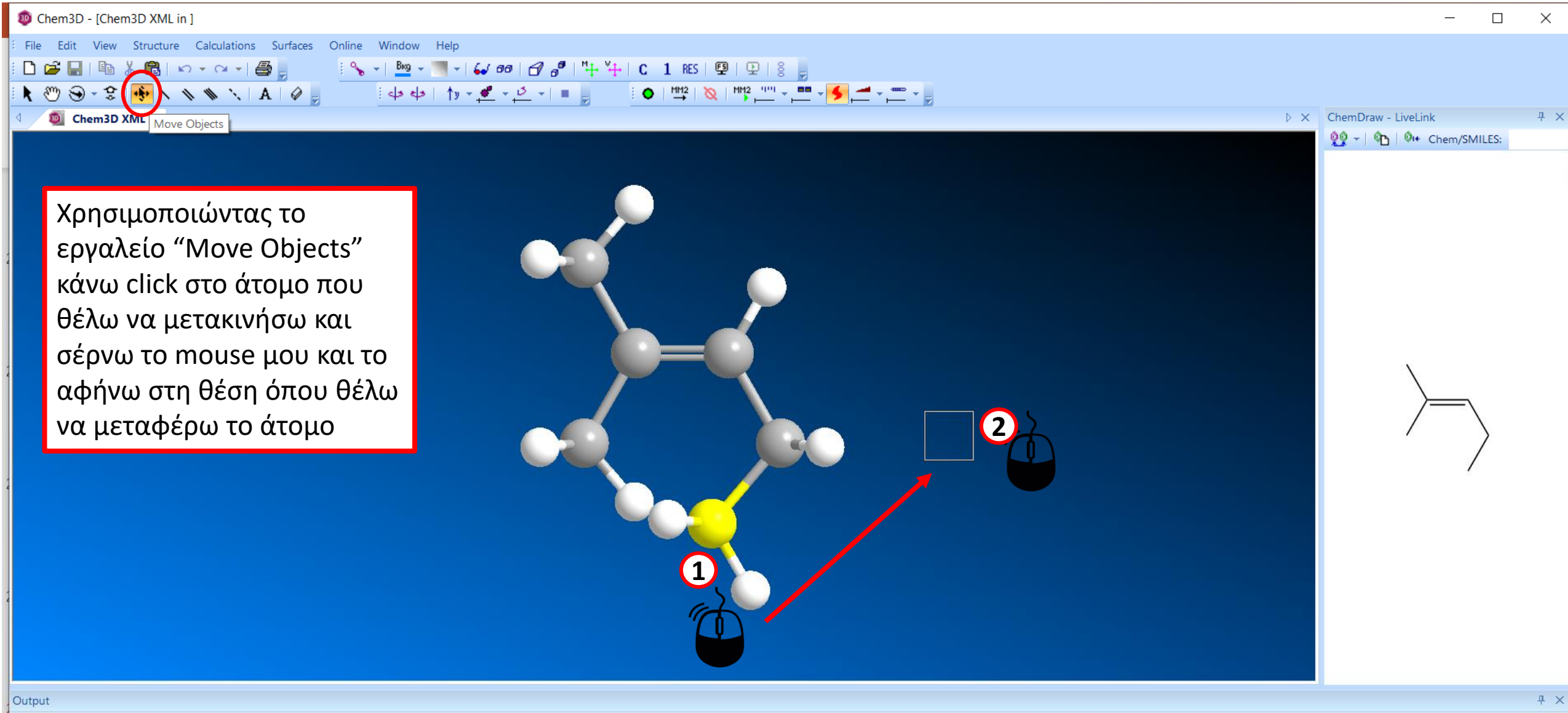
Μετακίνηση της δομής στην επιφάνεια εργασίας

Μεγέθυνση και σμίκρυνση

Μετακίνηση/αλλαγή θέσης ενός ατόμου

Output

## “Ball and Stick” απεικονίσεις – Chem3D (συνέχεια)



Χρησιμοποιώντας το εργαλείο “Move Objects” κάνω click στο άτομο που θέλω να μετακινήσω και σέρνω το mouse μου και το αφήνω στη θέση όπου θέλω να μεταφέρω το άτομο

1

2

Chem3D - [Chem3D XML in]

File Edit View Structure Calculations Surfaces Online Window Help

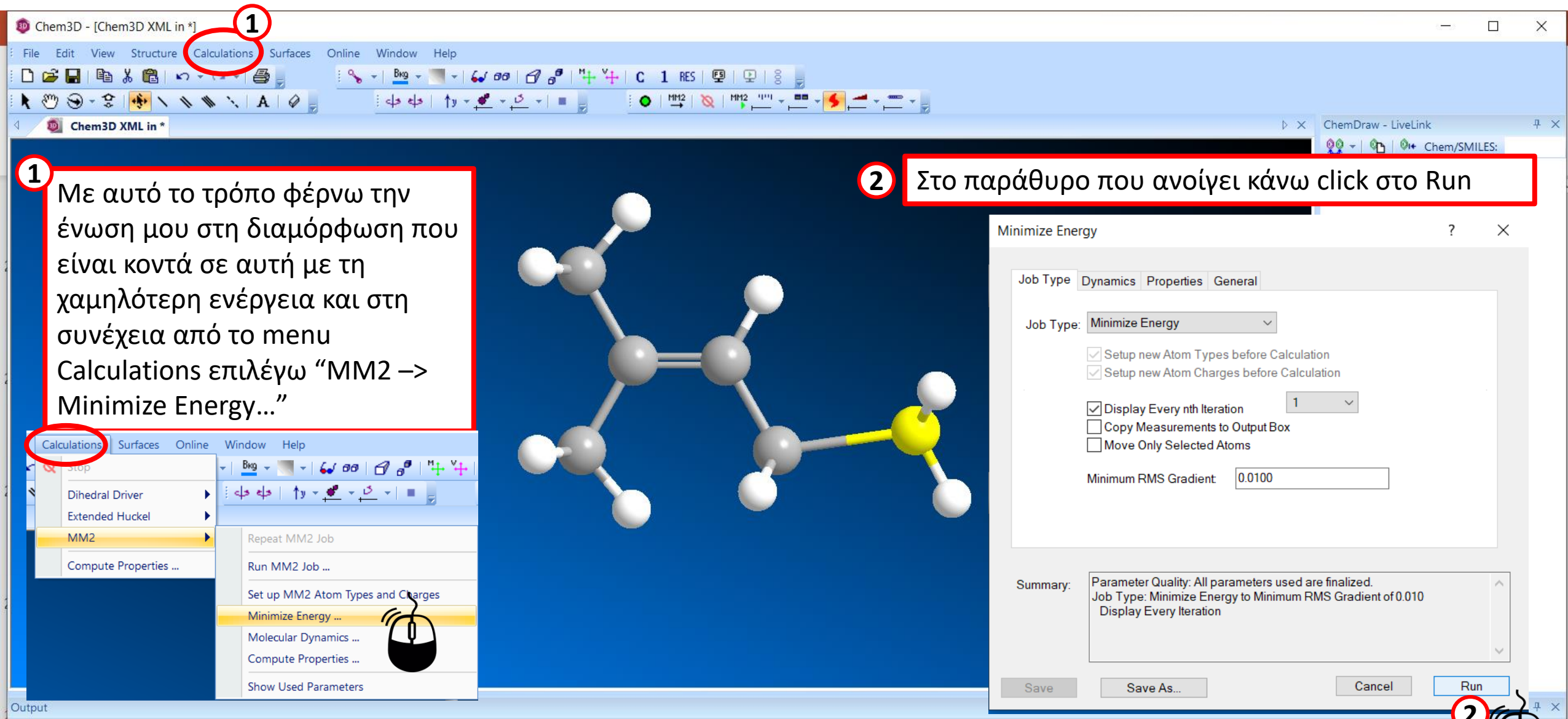
Chem3D XML Move Objects

ChemDraw - LiveLink

Chem/SMILES:

Output

# “Ball and Stick” απεικονίσεις – Chem3D (συνέχεια)



The image shows a screenshot of the Chem3D software interface. The main window displays a ball-and-stick model of a molecule. A red box labeled '1' highlights the 'Calculations' menu, which is open, showing the 'Minimize Energy...' option. A red box labeled '2' highlights the 'Run' button in the 'Minimize Energy' dialog box. The dialog box contains the following settings:

- Job Type: Dynamics Properties General
- Job Type: Minimize Energy
- Setup new Atom Types before Calculation
- Setup new Atom Charges before Calculation
- Display Every nth Iteration: 1
- Copy Measurements to Output Box
- Move Only Selected Atoms
- Minimum RMS Gradient: 0.0100

The Summary section of the dialog box reads: "Parameter Quality: All parameters used are finalized. Job Type: Minimize Energy to Minimum RMS Gradient of 0.010 Display Every Iteration". The 'Run' button is highlighted with a red box and a mouse cursor icon.

1 Με αυτό το τρόπο φέρνω την ένωση μου στη διαμόρφωση που είναι κοντά σε αυτή με τη χαμηλότερη ενέργεια και στη συνέχεια από το menu Calculations επιλέγω “MM2 → Minimize Energy...”

2 Στο παράθυρο που ανοίγει κάνω click στο Run

3 Όταν τελειώσει ο υπολογισμός θα έχω τη διαμόρφωση με την ελάχιστη ενέργεια



## “Ball and Stick” απεικονίσεις – Chem3D (συνέχεια)

Έχοντας επιλεγμένο το εργαλείο Select και φέρνοντας το δείκτη μου πάνω από κάποιο δεσμό μου δίνει το μήκος δεσμού.

Αν επιλέξω ένα άτομο (γίνεται κίτρινο) και φέρω το δείκτη μου πάνω στο δεσμό που σχηματίζουν τα επόμενα δύο άτομα τότε μου δίνει τη γωνία που σχηματίζουν αυτά τα τρία άτομα.

Επιλογή

Φέρνω το δείκτη μου πάνω στο δεσμό

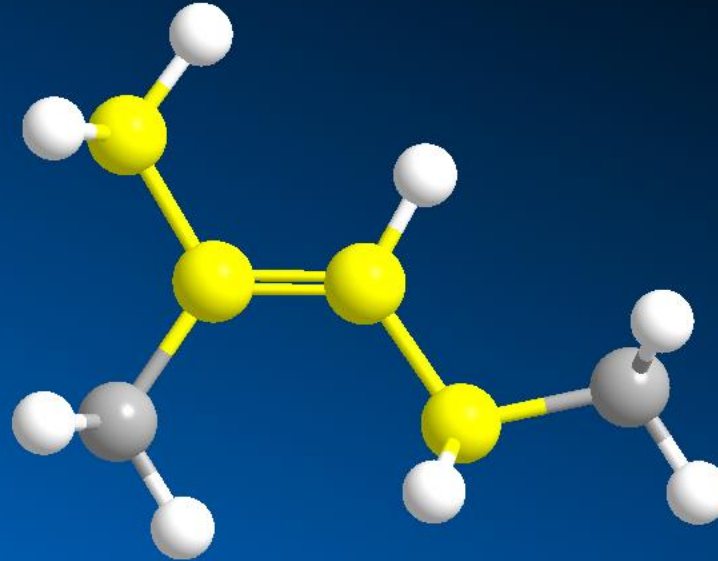
C(1)-C(4)  
Length: 1.511Å

C(1)-C(2)  
Length: 1.345Å  
C-C-C: 121.4°

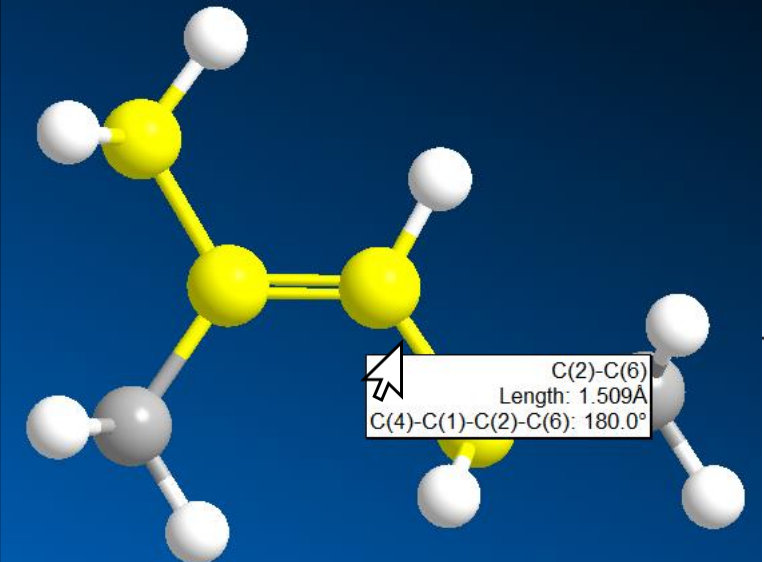
Chem3D - [Chem3D XML in \*]  
File Edit View Structure Calculations Surfaces Online Window Help  
Bkg  
MM2  
ChemDraw - LiveLink  
Chem/SMILES:  
Output

## “Ball and Stick” απεικονίσεις – Chem3D (συνέχεια)

Μπορώ να επιλέξω περισσότερα του ενός άτομο με το Select, κάνοντας αριστερό click και έχοντας παράλληλα πατημένο το *Shift*.



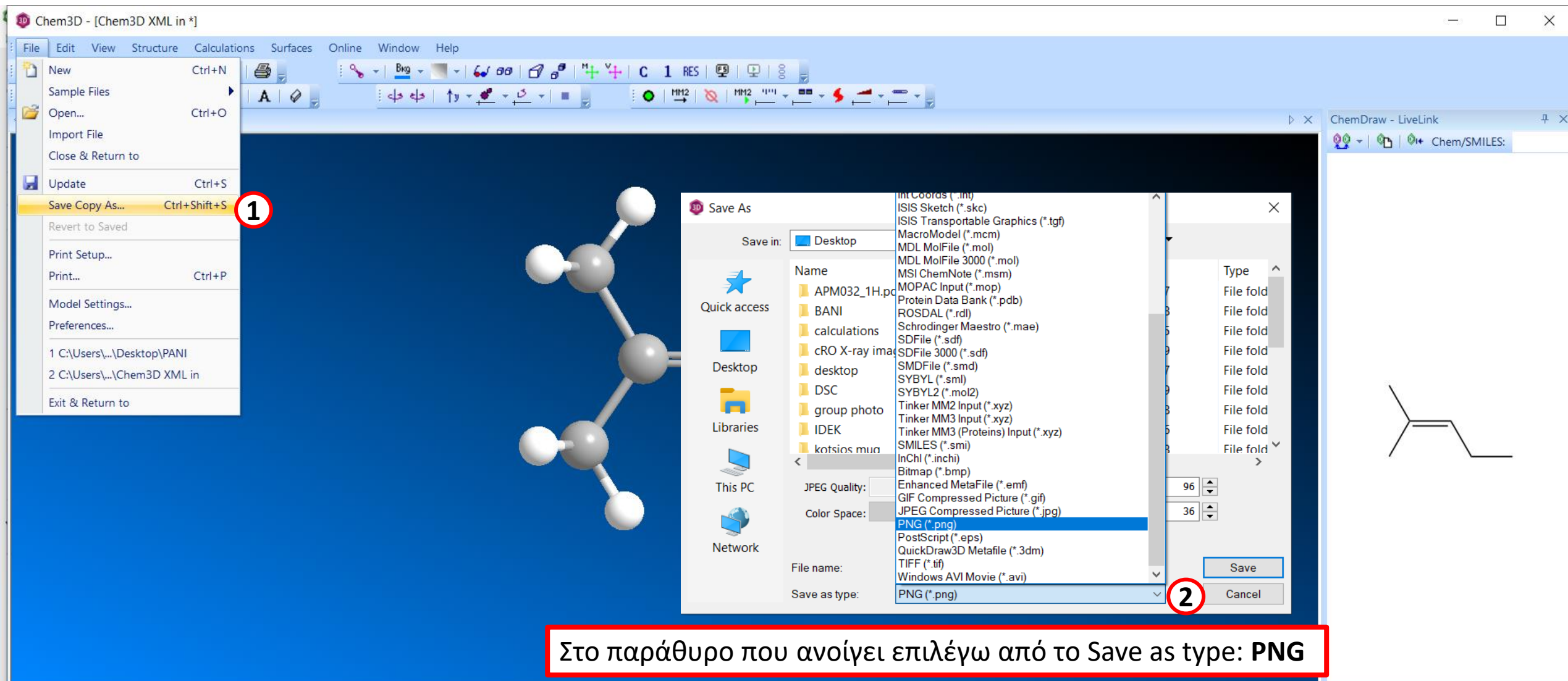
Έχοντας επιλεγμένα τέσσερα άτομα φέρνοντας το δείκτη πάνω στους δεσμούς μου δίνει τη διέδρη γωνία.





## “Ball and Stick” απεικονίσεις – Chem3D (συνέχεια)

Για να μετατρέψω σε εικόνες αυτές τις απεικονίσεις και να μπορώ να τις χρησιμοποιήσω τότε πηγαίνω από το menu File στο Save Copy As...



The screenshot shows the Chem3D software interface. The 'File' menu is open, and the 'Save Copy As...' option is highlighted with a red circle and the number '1'. The 'Save As' dialog box is open, showing the 'Save in' location as 'Desktop'. The 'Save as type' dropdown is set to 'PNG (\*.png)', which is also highlighted with a red circle and the number '2'. The dialog box lists various file formats, including .mol, .sdf, .pdb, .xyz, .smi, .emf, .gif, .jpg, .png, .eps, and .avi. The 'File name' field is empty, and the 'Save' button is visible.

Στο παράθυρο που ανοίγει επιλέγω από το Save as type: **PNG**

## Στοιχεία επικοινωνίας



kogioni.maria@ucy.ac.cy



@MariaKoyioni



+35722892804